



Etude de l'influence de l'environnement plasma sur les sections efficaces d'excitation collisionnelle électron-ion dans un plasma chaud et dense

François de Gaufridy de Dortan

► To cite this version:

François de Gaufridy de Dortan. Etude de l'influence de l'environnement plasma sur les sections efficaces d'excitation collisionnelle électron-ion dans un plasma chaud et dense. Physique Atomique [physics.atom-ph]. Université Paris Sud - Paris XI, 2003. Français. NNT : . tel-00008508

HAL Id: tel-00008508

<https://theses.hal.science/tel-00008508>

Submitted on 16 Feb 2005

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS XI

Spécialité :

LASERS ET MATIÈRE

présentée par

François DE GAUFRIDY DE DORTAN

pour obtenir le grade de Docteur en Sciences de l'Université Paris XI

Sujet de la thèse :

**ETUDE DE L'INFLUENCE DE L'ENVIRONNEMENT
PLASMA SUR LES SECTIONS EFFICACES D'EXCITATION
COLLISIONNELLE ÉLECTRON-ION DANS UN PLASMA
CHAUD ET DENSE**

Organisme d'accueil :

COMMISSARIAT À L'ÉNERGIE ATOMIQUE

soutenue le 14 mars 2003 devant la commission d'examen

| | |
|---------------------------|-----------------------|
| Monsieur Jacques Bauche | Co-directeur de Thèse |
| Monsieur Thomas Blenski | Rapporteur |
| Monsieur Jacques Dubau | Président |
| Monsieur François Perrot | Invité |
| Monsieur Olivier Peyrusse | Directeur de Thèse |
| Monsieur Bernard Talin | Rapporteur |

THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS XI

Spécialité :

LASERS ET MATIÈRE

présentée par

François DE GAUFRIDY DE DORTAN

pour obtenir le grade de Docteur en Sciences de l'Université Paris XI

Sujet de la thèse :

**ETUDE DE L'INFLUENCE DE L'ENVIRONNEMENT
PLASMA SUR LES SECTIONS EFFICACES D'EXCITATION
COLLISIONNELLE ÉLECTRON-ION DANS UN PLASMA
CHAUD ET DENSE**

Organisme d'accueil :

COMMISSARIAT À L'ÉNERGIE ATOMIQUE

soutenue le 14 mars 2003 devant la commission d'examen

| | |
|---------------------------|-----------------------|
| Monsieur Jacques Bauche | Co-directeur de Thèse |
| Monsieur Thomas Blenski | Rapporteur |
| Monsieur Jacques Dubau | Président |
| Monsieur François Perrot | Invité |
| Monsieur Olivier Peyrusse | Directeur de Thèse |
| Monsieur Bernard Talin | Rapporteur |

Table des matières

| | |
|---------------------------------------------------------------------|-----------|
| Notice | 9 |
| Introduction | 11 |
| 0.1 La fusion par Confinement Inertiel | 11 |
| 0.2 L'interaction Laser-Matière | 13 |
| 0.3 Environnement | 13 |
| 0.4 Plan du travail | 15 |
| 1 Effets de densité | 19 |
| 1.1 Introduction | 19 |
| 1.2 Modèles d'équilibre dans les plasmas | 20 |
| 1.2.1 Equilibre Thermodynamique Complet | 20 |
| 1.2.2 Equilibre Thermodynamique Local (ETL) | 20 |
| 1.2.3 Lois statistiques d'équilibre | 20 |
| 1.2.4 Limites | 21 |
| 1.2.5 Résolution des systèmes Hors ETL : transitions élémentaires. | 23 |
| 1.2.6 Equilibre Collisionnel Radiatif (CR) | 24 |
| 1.3 Caractéristiques et définition des plasmas denses | 25 |
| 1.4 Les écrantages | 26 |
| 1.4.1 Modèle de Debye-Hückel | 27 |
| 1.4.2 A plus haute densité | 28 |
| 1.4.3 Influence sur la position des niveaux | 29 |
| 1.4.4 Ionisation par pression et réduction du nombre de niveaux . . | 30 |
| 1.4.5 Influence sur les transitions radiatives | 31 |
| 1.4.6 Influence sur les transitions collisionnelles | 31 |
| 1.4.7 Pour conclure sur l'écrantage... | 33 |
| 1.5 Influence du Microchamp Ionique | 33 |
| 1.5.1 Domaine d'application | 34 |
| 1.5.2 Quelques effets connus du microchamp | 36 |

| | | |
|----------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 1.5.3 | Limite d'Inglis-Teller | 36 |
| 1.5.4 | Influence du microchamp sur les transitions collisionnelles : la recombinaison diélectronique | 37 |
| 1.6 | Conclusion | 38 |
| 2 | Le microchamp ionique | 39 |
| 2.1 | Introduction | 39 |
| 2.2 | Modèles théoriques | 40 |
| 2.2.1 | Définitions et paramètres | 41 |
| 2.2.2 | Distribution de Holtsmark | 41 |
| 2.2.3 | Distribution Plus Proche Voisin | 42 |
| 2.2.4 | Distribution de Mayer | 42 |
| 2.2.5 | Méthode de Monte Carlo | 43 |
| 2.3 | Cas pratiques avec la méthode de Monte Carlo | 44 |
| 2.4 | Comparaisons | 44 |
| 2.5 | Conclusion | 45 |
| 3 | Effet Stark | 49 |
| 3.1 | Introduction | 49 |
| 3.2 | Théorie de l'effet Stark | 50 |
| 3.2.1 | Éléments de matrice généraux | 50 |
| 3.2.2 | Cas hydrogénoïde | 51 |
| 3.3 | Résultats et notation | 52 |
| 3.4 | Généralisation | 53 |
| 3.5 | Limite d'Inglis-Teller | 54 |
| 3.6 | Conclusion | 55 |
| 4 | Excitations collisionnelles | 59 |
| 4.1 | Introduction | 59 |
| 4.2 | Principes généraux sur la diffusion | 60 |
| 4.3 | Les excitations collisionnelles par la théorie des perturbations | 61 |
| 4.3.1 | Rappel sur les méthodes perturbatives | 61 |
| 4.3.2 | La formule de Born | 62 |
| 4.3.3 | La formule de Bethe | 64 |
| 4.3.4 | Quelques remarques sur les sections efficaces de Born | 64 |
| 4.3.5 | Quelques raffinements possibles | 65 |
| 4.4 | L'approximation Distorted Waves (DW) | 66 |
| 4.4.1 | Développement en ondes partielles distordues | 66 |
| 4.4.2 | Forces de collision Ω | 69 |

| | | |
|----------|---------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 4.4.3 | Calcul des éléments de matrice diélectroniques | 69 |
| 4.4.4 | Orthogonalisation des fonctions d'onde libres dans les intégrales d'échange | 71 |
| 4.5 | Excitations collisionnelles en présence de champ électrique | 72 |
| 4.5.1 | Etudes antérieures | 72 |
| 4.5.2 | Modèle Distorted Waves sans couplage spin-orbite | 73 |
| 4.5.3 | Modèle Distorted Waves en couplage LSJ | 75 |
| 4.5.4 | Convergence des forces de collision partielles aux grands mo- ments angulaires | 77 |
| 4.5.5 | Comparaison de ces modèles avec du Néon hydrogéoïde | 83 |
| 4.6 | Taux de transition | 92 |
| 4.6.1 | Moyenne sur la distribution des vitesses | 92 |
| 4.6.2 | Moyenne sur la distribution du microchamp | 93 |
| 4.7 | Réalisation numérique | 94 |
| 4.7.1 | Structure atomique | 94 |
| 4.7.2 | Fonctionnement du code | 94 |
| 4.7.3 | Lissage des forces de collision et des taux collisionnels | 95 |
| 4.7.4 | Comparaison avec quelques résultats existants | 96 |
| 4.8 | Conclusion | 99 |
| 5 | Résultats | 101 |
| 5.1 | Introduction | 101 |
| 5.2 | Transitions de couche K : quelques lois simples | 102 |
| 5.3 | Quelques exemples pour l'Aluminium hydrogéoïde | 103 |
| 5.4 | Lois d'échelle | 105 |
| 5.5 | Spectres Collisionnels-Radiatifs | 106 |
| 5.5.1 | Forces de collision | 107 |
| 5.5.2 | Taux radiatifs | 109 |
| 5.5.3 | Emissivité et populations | 110 |
| 5.5.4 | Elargissement collisionnel électronique | 111 |
| 5.5.5 | Aluminium hydrogéoïde | 112 |
| 5.5.6 | Aluminium héliumoïde | 113 |
| 5.6 | Conclusion | 115 |
| | Conclusion | 131 |
| | A Niveaux de l'Aluminium Hydrogéoïde | 135 |
| | B Niveaux de l'Aluminium Héliumoïde | 137 |

| | | |
|----------|----------------------------------------------------------------------|------------|
| C | Electrons libres | 141 |
| D | Éléments de matrice coulombiens : excitation d'ions complexes | 145 |
| E | Éléments de matrice monoélectroniques d'ions complexes | 153 |
| | Bibliographie | 155 |

Notice

** Les grandeurs vectorielles sont indiquées en caractère **gras**.

** Il existe en physique atomique et physique des plasmas de nombreux systèmes d'unités. Par souci de clarté, nous avons choisi, dans ce document, d'utiliser de façon systématique les **Unités Atomiques (u.a.)** à l'exception des énergies qui seront exprimées en **Rydberg (1 Ryd = 1/2 u.a.)**. Il y aura néanmoins quelques mentions dans des unités plus usuelles, à échelle macroscopique, elles seront alors précisées.

| Quantité | Valeur de l'u.a. en unités courantes | quantités importantes en unités atomiques |
|----------------------|------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Masse | $m_e = 9.108 \cdot 10^{-31} kg$ | Masse de l'électron = 1 Masse du proton = 1836 |
| Longueur | $a_0 = \hbar/m_e e^2$ $= 0.52917 \cdot 10^{-8} cm$ | Rayon de la première orbite de Bohr = 1 |
| Densité | $1/a_0^3 = 6.749 \cdot 10^{24} cm^{-3}$ | |
| Temps | $\tau_0 = a_0 \hbar / e^2$ $= 2.4189 \cdot 10^{-17} s$ | Durée d'une révolution sur la première orbite de Bohr = 2π |
| Vitesse | $e^2/\hbar = 2.1877 \cdot 10^8 cm.s^{-1}$ | Vitesse de l'électron sur la première orbite de Bohr = 1 Vitesse de la lumière = $c = 137.037$ Const. de structure fine = $\alpha = \frac{1}{137.037}$ Constante de Planck = $h = 2\pi$ |
| Moment angulaire | $\hbar = h/2\pi$ $= 1.0544 \cdot 10^{-34} J.s^{-1}$ | |
| Energie | $e^2/a_0 = 2Rydberg$ $= 27.21 eV = 4.36 \cdot 10^{-18} J$ | Energie d'ionisation de l'hydrogène = 1/2 |
| Charge électrique | $e = 1.6022 \cdot 10^{-19} C$ | Charge de l'électron = -1 $1/4\pi\epsilon_0 = 1$ |
| Champ électrique | $e/a_0^2 = 1.7152 \cdot 10^7 statvolts/cm$ $= 5.1436 \cdot 10^9 volts/cm$ | Champ électrique sur la première orbite de Bohr = 1 |

Nous présentons ici quelques notations utilisées régulièrement au cours de cet ouvrage :

E : Energie d'un niveau ou d'un électron libre

\mathcal{E} : Champ électrique

g : Dégénérescence d'un niveau

\mathbf{k} : Impulsion d'un électron libre

λ_D : Longueur d'écran de Debye

$N_e = Z^* N_i$: Densité électronique

N_i : Densité ionique

Ω : Force de collision

$P(\mathcal{E})$: distribution de microchamp ionique

$R_i = R_{ii} = r_{ws}$: Rayon de Wigner-Seitz ou rayon de la sphère ionique ou distance interionique moyenne

$\langle r_{at} \rangle$: Rayon moyen de l'ion ou atome

σ : Section efficace

$\langle \sigma v \rangle$: Taux collisionnel

T_e : Température électronique

T_i : Température ionique

Z : Charge nucléaire de l'ion

$Z^* = \bar{Z}$: charge ionique ou ionisation moyenne du plasma

Enfin, les suffixes i et f indiquent que l'élément suffixé appartient à l'état initial ou final.

Introduction

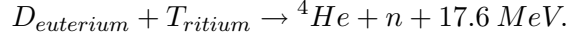
0.1 La fusion par Confinement Inertiel

L'essentiel des ressources énergétiques employées par les hommes a été jusqu'ici fourni par le biais de réactions chimiques exothermiques. Des travaux menés durant tout le siècle passé ont montré l'existence de réactions beaucoup plus énergétiques (de l'ordre du MeV/nucléon soit environ 1 Million de fois l'énergie dégagée au cours d'une réaction de combustion par exemple) que ce soit par dislocation d'un noyau lourd en plusieurs morceaux (fission) ou par agrégation de plusieurs éléments légers (fusion).

Même si les réactions de fission entretenues et naturelles sont quasi inexistantes dans l'univers, à l'exception du "réacteur" d'Oklo ayant "fonctionné" il y a deux milliards d'années au Gabon, la création de réacteurs artificiels a été très tôt envisagée et mise en oeuvre dès 1943 pour être ensuite largement répandue. Elle compte aujourd'hui pour plus de 70 % de la production d'électricité en France et plus du tiers de sa consommation primaire d'énergie, tandis qu'à l'échelle mondiale environ 7% de l'énergie primaire commerciale en est originaire, sans compter les multiples applications divergentes qui en sont issues : médicales, armement ...

A l'inverse, les réactions de fusion, bien qu'omniprésentes dans l'univers et bien visibles à travers toutes les étoiles, ont connu une utilisation beaucoup plus limitée ; même si de nombreuses équipes à travers le monde s'emploient à les étendre, ses applications pratiques se résument à l'heure actuelle à des dégagements d'énergie ponctuels et volontairement massifs depuis 1952. La difficulté de leur contrôle à petite échelle et donc la clef de leur emploi à des fins plus civiles est liée à la maîtrise des conditions extrêmes de température et/ou de pression qui sont nécessaires pour leur amorçage. Un résumé succinct permettra d'appréhender les contraintes qui s'imposent à l'expérimentateur.

La réaction de fusion la plus accessible et donc la plus courtisée, la réaction D-T, s'écrit :



Elle s'effectue de façon notable à partir de la température de seuil $T=4.5 \cdot 10^7 \text{ K}$ (nécessaire pour vaincre la barrière de répulsion électrostatique des noyaux). Il est possible d'accéder brièvement aux ordres de grandeur caractérisant la densité et le temps de confinement requis simultanément pour parvenir à l'ignition et à l'entretien de la réaction de manière rentable. Le nombre de réactions par unité de temps et de volume s'écrit :

$$N_{\text{Reaction}}(cm^{-3}s^{-1}) = N_{\text{Tritium}} \times N_{\text{Deuterium}} \times \langle \sigma v \rangle$$

où σ est la section efficace de réaction et $\langle \sigma v \rangle$ représente le taux moyenné sur la distribution des vitesses ($\approx 3 \cdot 10^{17} cm^3 s^{-1}$). Le critère de Lawson établit la frontière à partir de laquelle les réactions thermonucléaires dégagent deux fois plus d'énergie qu'il n'en a fallu pour chauffer le milieu :

$$N_{\text{Reaction}} \times E_{\text{Reaction}} \times \tau \geq 2 \times (N_D + N_T) \times T.$$

Pour $T = 6 \cdot 10^7 K \approx 5.5 KeV$ et les conditions optimales de répartition, c'est-à-dire l'équipartition du Deuterium et du Tritium, cette condition adopte la forme simplifiée comme un produit de la densité par le temps de confinement :

$$N \times \tau \geq 10^{14} cm^{-3}s.$$

Nous l'avons vu, les températures nécessaires sont élevées et ont tendance à détendre le milieu d'autant plus vite qu'il est dense. Il en résulte deux approches opposées pour dominer cette difficulté :

- une voie faible densité ($10^{14} cm^{-3}$), fort volume et des temps de confinement inférieurs à la seconde dans les Tokamaks [17],
- une voie haute densité ($10^{25} cm^{-3}$) pour des temps de confinement extrêmement brefs, de l'ordre de quelques dizaines de picosecondes, dans la Fusion par Confinement Inertiel (FCI).

Ce dernier programme met en jeu des conditions extrêmes de la matière, où les théories classiques reposant sur la mise à l'équilibre des différents paramètres caractérisant le milieu, appelé plasma, sont régulièrement invalidées. Les distributions de ses trois espèces constitutives (ions, électrons, photons) n'obéissent plus aux règles de la statistique de l'équilibre thermodynamique, où seule intervient la notion d'énergie, mais résultent d'une compétition entre divers **processus microscopiques collisionnels ou radiatifs**. Le détail et la compréhension de ces différents

phénomènes dans les plasmas denses et chauds sont donc indispensables pour pouvoir prétendre éclairer les nombreux aspects des expériences de FCI [20] et font l'objet de très nombreuses recherches à l'heure actuelle ; cette étude s'inscrit dans ce cadre.

0.2 L'interaction Laser-Matière

Il est bon de noter que ces travaux ont été fertiles dans d'autres domaines et en particulier dans tous ceux ayant trait à la **matière chaude et dense**, quel que soit son mode d'apparition : interaction laser-matière, plasmas produits par Z-pinch ou plasmas astrophysiques.

Les plasmas chauds et denses présentent l'intérêt d'être fortement émissifs dans les régions spectrales entre 100 eV et 10 KeV, ce qui permet de les caractériser ou bien de les utiliser comme source sonde pour étudier les propriétés d'un matériau adjacent. Le développement des lasers de très haute intensité (jusqu'à $10^{20} W cm^{-2}$) et d'impulsion brève (réduite à quelques centaines de Femtosecondes) a permis la réalisation de sources X très ponctuelles, résolues en temps et aux domaines d'applications variés. Quelques grands thèmes de recherche actuels s'ensuivent :

- la dynamique des réactions chimiques [69]
- la cristallographie [2],
- la biologie [45], [49], [80],
- la médecine [78] et en particulier la radiographie [46].

Cette liste serait très incomplète si elle ne mentionnait les nombreux travaux sur le laser X-UV, sources cohérentes et très brillantes, qui en plus de la fructueuse comparaison entre la théorie et l'expérience, présentent comme domaines d'application l'ensemble des thèmes précités, en y ajoutant la lithographie à des fins microélectroniques, la microscopie ou holographie de cellules biologiques... sans oublier de nombreux diagnostics cruciaux en FCI, en élargissant les profondeurs accessibles par interférométrie optique aux densités électroniques élevées, en permettant l'étude de la croissance des instabilités hydrodynamiques qui s'y développent, de la densité... [13]

0.3 Environnement

Toutes ces applications reposent sur des phénomènes extrêmement brefs où de multiples processus sont en compétition. Ces processus sont essentiellement de deux types : collisionnels et radiatifs, sans compter les interactions non linéaires entre le plasma et le faisceau laser ou les phénomènes purement hydrodynamiques. Un pro-

cessus radiatif correspond à l'émission ou à l'absorption d'un photon par un ion du plasma et à une modification du cortège électronique de cet ion. Une transition collisionnelle résulte de l'impact d'une autre particule du plasma, le plus probablement un électron, sur un ion, induisant chez lui une forte perturbation de ses électrons liés.

Au cours de l'impact bref d'un laser de forte puissance avec un matériau, il se forme un plasma qui, schématiquement, a trois zones successives. Celles-ci présentent, en raison de leurs caractéristiques différentes de densité et de pression, trois mécanismes distincts de peuplement de leurs niveaux ioniques (Figure en fin d'introduction).

En aval du milieu se trouve une zone très chaude et de très faible densité (zone 1) où les niveaux fondamentaux sont prédominants, l'état de leurs populations étant gouverné par l'ionisation collisionnelle et la recombinaison radiative. Les niveaux excités sont, eux, peuplés par excitation collisionnelle et se dés excitent essentiellement radiativement en raison de la très faible densité électronique. Un tel équilibre, dominé par les transitions radiatives, est dit coronal.

Au contraire, totalement en amont, juste en deçà de la zone non perturbée, se trouve une zone sous choc (zone 3), très comprimée et relativement froide. Les transitions collisionnelles, induites par la très forte densité d'électrons libres thermalisés, sont prépondérantes et mènent le milieu à un état d'équilibre thermodynamique. Les populations des niveaux ioniques y sont régies par les lois statistiques d'équilibre thermodynamique dépendant seulement de quelques paramètres macroscopiques : température, pression...

La zone intermédiaire (zone 2) est caractérisée par de forts gradients de densité et de température, où les niveaux excités ne sont plus négligeables devant les états fondamentaux et qui est donc particulièrement émissive. Le peuplement de ces niveaux résulte de la compétition entre l'ensemble des transitions radiatives et collisionnelles, dont **les excitations collisionnelles électron-ion** qui sont l'objet de ce mémoire.

Dans le cas de milieux denses et chauds, les particules présentes se perturbent mutuellement et ne peuvent être suivies individuellement du fait de leur grand nombre (typiquement 10^{23} cm^{-3} dans un solide). Une approche statistique qui caractérise globalement l'ensemble des perturbations possibles et leurs effets est donc nécessaire. Deux types de moyennes, de philosophies opposées, sont envisageables :

- soit une moyenne sur la cause de la perturbation (la position et la vitesse des particules avoisinantes dans le cas de plasmas chauds et denses), suivie du calcul de l'effet de cette moyenne ; cette méthode présentant l'avantage de simplifier notablement la physique sous-jacente et donc les calculs, au prix d'une réduction importante du nombre d'informations sur le milieu,

- soit une moyenne sur les effets après avoir observé configuration par configuration l’effet des différentes causes ; la richesse des multiples situations perturbatives prises en compte ayant pour coût un traitement beaucoup plus lourd.

Dans le cas des plasmas chauds et denses, la cause est la densité et la grande proximité des nombreuses particules, les effets, multiples, se manifestant dans le décalage des énergies, la modification des fonctions d’onde ainsi que des taux de transition.

La première approche, très simplificatrice, regroupe les théories d’écrantage, électronique ou ionique, très adaptées lorsque les perturbations évoluent de nombreuses fois au cours du phénomène étudié. La seconde voie, qui échantillonne l’ensemble des configurations des atomes les uns par rapport aux autres, avec plus ou moins de particules prises en compte, a donné naissance aux approches quasi-moléculaires et de **microchamp**. La non-isotropie de la distribution des particules perturbatrices, due aux fluctuations thermiques, engendre l’apparition de **champs électriques**. Cette méthode est pertinente lorsque les différentes particules responsables du champ bougent peu et donc quand le champ reste sensiblement statique au cours, par exemple, d’un processus collisionnel, où l’électron, très vélocé, n’interagit que de manière très brève avec la cible. Elle est donc particulièrement judicieuse pour décrire les perturbations induites par les ions, peu mobiles, sur les phénomènes faisant intervenir exclusivement des électrons, très rapides.

C’est l’originalité de l’approche que nous avons choisie pour étudier l’influence de la densité sur les excitations collisionnelles. Aucune étude détaillée de ce sujet n’a été effectuée à ce jour.

0.4 Plan du travail

Cette thèse, effectuée au Commissariat à l’Energie Atomique (Bruyères le Châtel), porte sur la perturbation des sections efficaces d’excitation collisionnelle électronique par l’environnement plasma, décrit par le microchamp ionique. Cette étude théorique nous a permis de réaliser un code numérique autonome qui calcule les forces de collisions dans l’approximation Distorted Waves (DW) en utilisant des données atomiques précises et un microchamp reproduisant fidèlement la réalité.

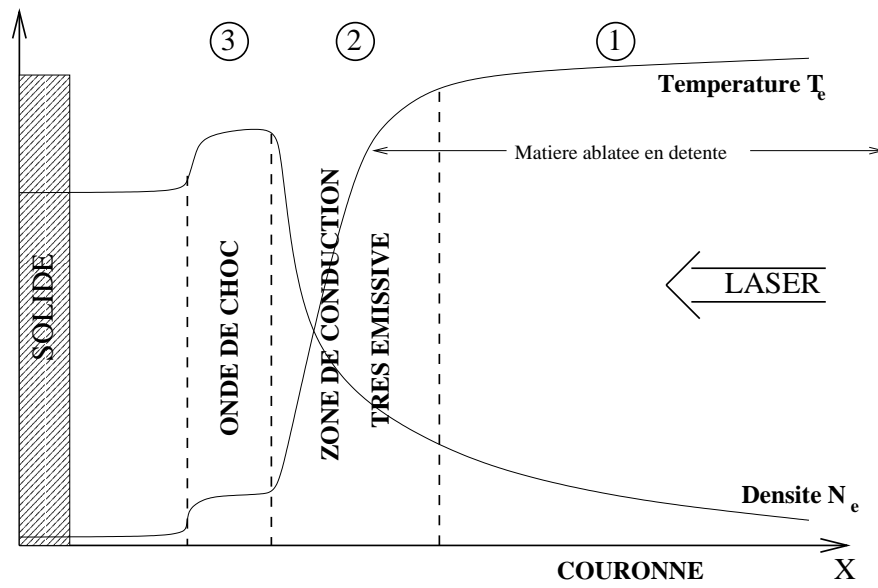
Ce mémoire est composé de cinq parties relativement indépendantes :

- Le premier chapitre concerne le traitement général des densités élevées. Une étude détaillée du plasma est coûteuse, elle n’a donc d’intérêt que dans la mesure où le plasma est hors équilibre et que l’étude de ses caractéristiques spectrales nécessite la prise en compte des phénomènes collisionnels, très gourmands numériquement. Les méthodes d’écrantage, qui conduisent à modéliser le plasma par un potentiel central, ont permis d’étudier certains phénomènes

moyennés en temps dans les plasmas denses, mais demeurent défailantes pour traiter les phénomènes très brefs, tandis que l'approche microchamp est d'ores et déjà utilisée avec succès pour le calcul des profils des raies de couche K.

- Le second chapitre est consacré à la description du microchamp. Les modèles de Holtsmark et de Mayer, analytiques, sont adaptés à la description de plasmas soit très dilués soit très dégénérés, une description plus générale s'impose. Le lissage d'un ensemble d'expériences numériques par tirage aléatoire Monte-Carlo développé par D. Gilles [30] a été adopté après une comparaison avec les modèles précédents.
- En troisième partie, comme préparation à l'étude des sections efficaces d'excitation collisionnelle sous champ, nous abordons l'influence du champ électrique sur la structure atomique : l'effet Stark. Nous résolvons le Hamiltonien de l'atome de façon perturbative et présentons plusieurs calculs sur l'énergie des niveaux et le mélange des fonctions d'onde pour l'aluminium hydrogénoïde et héliumoïde. Ceci nous permet de détailler les notations spectroscopiques employées ultérieurement. Quelques lois d'échelle en Z peuvent être établies sur les hydrogénoïdes puis nous réévaluons la limite d'Inglis-Teller qui définit les derniers niveaux atomiques observables dans un plasma très dilué, à l'aide du modèle de microchamp précédent.
- Le quatrième chapitre reprend les différentes méthodes existant pour le calcul des excitations collisionnelles. L'approximation de Born, de mise en oeuvre très simple, reste trop réductrice et approximative, nous avons donc choisi l'approximation Distorted Waves, qui dans un temps réduit et pour les ions multichargés, permet d'accéder, à quelques pourcent près, aux mêmes résultats que les théories les plus élaborées. Nous avons établi des équations pour le calcul des forces de collision en présence de champ électrique pour des ions multiélectroniques et avons réalisé un code numérique calculant simultanément les forces de collision et les taux collisionnels en présence de microchamp. La comparaison de nos résultats avec ceux de la littérature pour du Fer héliumoïde en l'absence de champ, ainsi qu'avec ceux d'une étude prospective sur du Néon hydrogénoïde en présence de microchamp, confirme la validité et la précision de nos calculs.
- Enfin, dans le dernier chapitre, nous démontrons que les excitations de couche K des ions mono- et diélectroniques, en présence de microchamp, peuvent s'écrire de façon simple, comme la moyenne des forces de collision ou taux collisionnels en l'absence de champ. Nous présentons, ensuite, une application de notre code à de l'Aluminium hydrogénoïde et héliumoïde et des profils de raies obtenus après avoir réalisé un code Collisionnel-Radiatif élémentaire,

n'intégrant que les transitions radiatives dipolaires électriques et les excitations et désexcitations collisionnelles. La prise en compte du microchamp électrique sur les sections efficaces d'excitation collisionnelle fait apparaître notablement les transitions des états issus des niveaux de moments angulaires élevés. En particulier, les sections efficaces des transitions initialement interdites augmentent de plusieurs ordres de grandeur en présence de champ électrique et deviennent de l'ordre de celles des transitions autorisées. Cet effet, cependant, n'élargit que légèrement les raies Ly β , γ et He γ .



Chapitre 1

Modèles de traitement des effets de densité dans les plasmas

1.1 Introduction

Durant ces dernières années, de nombreux efforts ont été effectués pour améliorer notre connaissance des plasmas denses. Ces travaux sont régulièrement présentés dans les séries de conférences *Radiative Properties of Hot Dense Matter* ou *Atomic Processes in Plasmas* et ont fait l'objet de plusieurs monographies, par exemple celles de Griem [33] et de Chabrier [16]. Le calcul de quantités qui caractérisent ces plasmas comme l'opacité, l'émissivité spectrale ou l'état d'ionisation, est central pour leur modélisation. A mesure que le plasma s'éloigne de son état d'équilibre où chaque processus de peuplement des différentes populations du plasma est compensé par le processus inverse, un détail plus précis des transitions microscopiques, responsables des modifications de peuplement, s'impose.

Malheureusement, les capacités prédictives des modèles fondés sur des ions isolés s'estompent quand ils deviennent plus corrélés. Il existe alors diverses méthodes perturbatives pour représenter l'influence des particules avoisinantes sur la particule émettrice. Notons au passage que la notion particulaire n'est pas évidente pour le traitement d'ensembles très corrélés. En toute rigueur, un tel ensemble nécessiterait d'être décrit comme un système global. Cependant, l'observation des spectres expérimentaux émis par de tels milieux révèle des structures de raies caractéristiques d'ions bien spécifiés par comparaison avec les spectres d'émission de ces ions isolés. On en conclut que les structures ioniques persistent et que ces particules peuvent être traitées comme des entités isolables perturbées par leur environnement.

1.2 Modèles d'équilibre dans les plasmas

1.2.1 Equilibre Thermodynamique Complet

Dans un plasma, les populations des différentes particules (électrons, photons et divers ions) sont gouvernées par l'ensemble des phénomènes microscopiques possibles. Lorsque chacun de ces processus collisionnel ou radiatif est exactement contrebalancé par son inverse, le détail de ces processus peut être remplacé par des lois statistiques simples reposant sur un très faible nombre de paramètres macroscopiques. Un tel état d'équilibre est dit complet (ETC). La température et la pression suffisent à le définir. Elles y sont uniformes, le rayonnement est isotrope et homogène. Les températures électronique, ionique et de rayonnement sont égales.

Cette situation se rencontre dans des milieux clôturés par des parois totalement opaques au rayonnement : des corps noirs. Dans tout autre cas, les pertes, radiatives ou de matière, la non-stationnarité des populations... empêchent d'atteindre l'équilibre thermodynamique complet. Il est néanmoins possible de trouver des états d'équilibre où des grandeurs macroscopiques permettent toujours de décrire le plasma.

1.2.2 Equilibre Thermodynamique Local (ETL)

Lorsque le système admet des pertes radiatives, il présente des gradients de densité et de température et son rayonnement présente un ensemble de raies qui contredit la répartition continue de l'intensité spectrale dans les milieux en ETC.

Cependant, si le système unique à la température T peut être remplacé par un ensemble de sous-systèmes à l'intérieur desquels la microréversibilité des transitions radiatives et collisionnelles est assurée, il est possible de définir un équilibre thermodynamique localement pour tout couple N, T de chaque sous-système. Cela suppose que les flux d'énergie entre eux sont faibles et revient à considérer que le nombre de transitions radiatives est négligeables devant le nombre de transitions collisionnelles. C'est le cas dans un plasma dense et de faible température, les lois statistiques de l'équilibre thermodynamique s'appliquent pour chaque sous-système, la densité assurant la thermalisation en leur sein.

1.2.3 Lois statistiques d'équilibre

Ces lois permettent de donner tout le détail des populations et ne dépendent que de l'énergie E de chaque élément considéré. Leur détermination se trouve dans tout ouvrage de physique atomique des plasmas (ex Sobelman [76, 77] ou Pecker-Wimel [56]) et ne sera pas reprise ici. Chacune de ces lois suppose que les particules qui com-

posent le plasma sont indiscernables et indépendantes, ce qui réduit immédiatement leur crédibilité lorsque le milieu est dense et les ions fortement couplés ou les électrons plus ou moins dégénérés.

- La loi de Maxwell qui établit la distribution des vitesses $f(v)$ pour les différentes particules est la plus vérifiée de toutes ces lois, lorsque les conditions expérimentales s'éloignent de l'équilibre. Elle sera supposée valable dans le reste de cet ouvrage pour la distribution des électrons libres. La pérennité de cette loi est due à la haute valeur de la fréquence de collision électron-électron qui assure la thermalisation en milieu dense et collisionnel. Elle s'écrit en fonction de l'énergie ($E = m_e v^2/2$)

$$f(E)dE = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{E^{1/2}}{T^{3/2}} e^{-E/T} dE \quad (1.1)$$

- La distribution de Boltzmann fixe les rapports de populations entre les différents niveaux d'un même ion.
- La loi de Saha donne la répartition des degrés d'ionisation des atomes.
- La loi de Planck régit la distribution de la densité de rayonnement en fonction de sa fréquence et n'est valable que dans le cas du corps noir.

1.2.4 Limites

La formulation très simple de ces lois est très attirante mais elles présentent un domaine de validité restreint. Dans un plasma supposé optiquement mince (où tout le rayonnement s'échappe), l'équilibre est principalement réalisé par les processus collisionnels, mais disparaît si la densité n'est pas suffisamment élevée. Mc Whirther [53] donne comme condition d'équilibre thermodynamique entre deux niveaux i et j :

$$N_e \geq 1.8 \cdot 10^{14} T_{e(eV)}^{1/2} \Delta E_{ij(eV)}^3 = 1.7 \cdot 10^{18} T_{e(Ryd)}^{1/2} \Delta E_{ij(Ryd)}^3 \quad (1.2)$$

qui peut être extrapolée à la condition d'équilibre entre deux états de charges différentes en remplaçant ΔE_{ij} par le potentiel d'ionisation. Par exemple, dans l'ion $Al\ XIII$, cette condition d'équilibre entre les états hydrogénoïdes et héliumoïdes s'écrit :

$$N_e \geq 4.5 \cdot 10^{17} T_{e(eV)}^{1/2} Z^6 \quad (1.3)$$

où $Z = 13$. Nous présentons dans le tableau 1.1 des valeurs numériques de ces limites d'ETL pour les éléments qui seront présentés dans le reste de cet ouvrage. La température choisie est de 500 eV, elle est intermédiaire parmi celles qui apparaîtront

par la suite et n'influe guère sur les résultats, dans la plage qu'elle parcourt au cours de ces pages (100 à 700 eV).

| | $n = 1 / n = 2$ | $n = 2 / n = 3$ | $n = 3 / n = 4$ | X_Z / X_{Z-1} |
|-----------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|
| <i>Ne X</i> | $4.3 \cdot 10^{24}$ | $2.8 \cdot 10^{22}$ | $1.2 \cdot 10^{21}$ | $7. \cdot 10^{24}$ |
| <i>Al XIII</i> | $2.1 \cdot 10^{25}$ | $1.3 \cdot 10^{23}$ | $5.7 \cdot 10^{21}$ | $3.7 \cdot 10^{25}$ |
| <i>Ar XVIII</i> | $1.5 \cdot 10^{26}$ | $9.4 \cdot 10^{23}$ | $4. \cdot 10^{22}$ | $2.9 \cdot 10^{26}$ |

TAB. 1.1 – Densités d'équilibre thermodynamique entre les différents niveaux hydrogénoïdes de Ne, Al et Ar ainsi qu'entre les états hydrogénoïde X_Z et héliumoïde X_{Z-1} des mêmes ions à $T_e=500\text{eV}$.

Nous avons précisé dans le paragraphe précédent que toutes les distributions électroniques utilisées dans le reste de cette étude seraient supposées maxwelliennes, de façon à pouvoir définir une température électronique. Dans le cas d'interactions laser-matière ultra-intenses (supérieures à 10^{15}W cm^{-2}), des mécanismes non linéaires conduisent à l'accélération d'une fraction non négligeable de cette population d'électrons dits suprathermiques, mis en évidence par l'émission de raies K_α au coeur de zones denses et relativement froides du plasma [26]. Krol *et al* [46] constatent que 10% de l'énergie du laser peut être transférée aux électrons suprathermiques. Dans ces conditions, l'équilibre thermique des électrons libres n'est pas réalisé et il perturbe aussi la distribution des électrons liés et donc celle des photons.

Enfin, tous ces processus d'équilibre reposent sur des temps de relaxation qui permettent à la matière, après toute perturbation, de se stabiliser dans un état stationnaire où il est à nouveau possible de spécifier températures et densités. P. Alaterre [4] calcule ces temps de relaxation τ entre niveaux de Al XIII - qui correspondent à l'inverse des taux de transition entre ces niveaux - pour $T_e = 500\text{eV}$ (mais les résultats dépendent peu de la température) dans une gamme de densité $10^{20} \text{cm}^{-3} \leq N_e \leq 10^{23} \text{cm}^{-3}$:

$$\begin{aligned}
 & - \text{ si } n = 2, \frac{1}{\tau} = 10^{13} + 1.6 \cdot 10^{11} \left(\frac{N_e}{10^{21}} \right) \\
 & - \text{ si } n = 3, \frac{1}{\tau} = 2.5 \cdot 10^{12} + 1.2 \cdot 10^{12} \left(\frac{N_e}{10^{21}} \right) \\
 & - \text{ si } n = 4, \frac{1}{\tau} = 5. \cdot 10^{11} + 4. \cdot 10^{12} \left(\frac{N_e}{10^{21}} \right).
 \end{aligned}$$

Dans des expériences typiques d'interaction laser-matière à très haut flux [62] où les durées d'impulsion laser sont de l'ordre de la centaine de femtosecondes, la condition en densité pour que le temps d'interaction entre le faisceau et la matière soit de l'ordre de deux fois celui de relaxation et qu'un équilibre stationnaire puisse s'établir est alors : $N_e \approx 6 \cdot 10^{22} \text{cm}^{-3}$ pour $n=2$, $N_e \approx 1.5 \cdot 10^{22} \text{cm}^{-3}$ pour $n=3$ et $N_e \approx 5 \cdot 10^{21} \text{cm}^{-3}$ pour $n=4$. Pour des temps d'interaction plus longs, l'état $n = 2$ est

toujours en équilibre stationnaire du fait des phénomènes radiatifs et les états de n supérieur sont dans le même état à partir de $N_e \approx 10^{21} \text{cm}^{-3}$.

Les temps de relaxation des équilibres stationnaires d'ionisation entre ions hydrogénoïde et héliumoïde sont plus longs et correspondent à peu près aux temps de relaxation des couches $n=1$ pour Al XIII et Al XII. Ils valent environ, à $N_e = 10^{22} \text{cm}^{-3}$, 15 picosecondes pour les hydrogénoïdes et 1 ps pour les héliumoïdes. Notons qu'état stationnaire ne veut pas dire équilibre thermodynamique, mais que l'absence d'état stationnaire empêche l'équilibre thermodynamique.

Nous retiendrons de tout ceci qu'il existe de nombreuses causes d'écart à l'équilibre, même local. Les transitions possibles entre les couches $n=1$ et $n=2$ devront être détaillées pour les densités inférieures à $N_e \approx 10^{25} \text{cm}^{-3}$ (pour Al XIII) comme pour celles entre $n=1$ et $n=3$. En revanche, celles entre $n=2$ et $n=3$, lorsqu'elles seront traitées, pourront être remplacées par la statistique de Boltzmann au delà de $N_e = 10^{23} \text{cm}^{-3}$. En outre, plus les temps d'impact laser seront brefs et plus les moyens d'étude du plasma créé permettront d'étudier de manière rapide son évolution, plus les calculs devront détailler avec précision chaque type de transition pour reproduire l'expérience.

1.2.5 Résolution des systèmes Hors ETL : transitions élémentaires.

Avant d'aller plus loin, il convient de préciser l'ensemble des interactions microscopiques qui conduisent à des transitions.

Les phénomènes d'excitation et d'ionisation dans les plasmas chauds sont en général gouvernés par les photons et les électrons, les autres particules massives n'intervenant que pour les transitions de très faible énergie. Les processus prépondérants sont au nombre de 12 (directs et inverses) radiatifs ou collisionnels :

- la photoexcitation et l'émission spontanée

$$X_Z + \hbar\omega \rightleftharpoons X_Z^* \quad (1.4)$$

- l'émission induite

$$X_Z^* + \hbar\omega \rightarrow X_Z + \hbar\omega + \hbar\omega \quad (1.5)$$

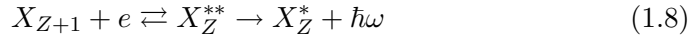
- la photoionisation et la recombinaison radiative

$$X_Z + \hbar\omega \rightleftharpoons X_{Z+1} + e \quad (1.6)$$

- la recombinaison radiative stimulée

$$X_{Z+1} + \hbar\omega + e \rightarrow X_Z + \hbar\omega + \hbar\omega \quad (1.7)$$

- la capture diélectronique et l’autoionisation (où X_Z^{**} est un état doublement excité)



- l’excitation et la désexcitation collisionnelles



- l’ionisation collisionnelle et la recombinaison à trois corps



Sobelman y adjoint Bremsstrahlung et Bremsstrahlung inverse ($X_Z + e \rightleftharpoons X_Z + e + \hbar\omega$: émission et absorption libre-libre) mais qui n’ont d’incidence que sur les transferts d’énergie entre électrons libres et photons et ne jouent donc que sur leurs populations et non sur celles des états internes ioniques (électrons liés).

Le calcul de tous ces taux n’est pas nécessaire, les taux inverses s’obtiennent directement à partir des taux directs par le principe du bilan détaillé à l’ETL (micro-réversibilité). C’est pourquoi, des deux mécanismes intéressant cette thèse -i.e. l’excitation et la désexcitation collisionnelles- nous n’étudierons que le premier, à partir du quatrième chapitre.

1.2.6 Equilibre Collisionnel Radiatif (CR)

Cette situation est celle où l’ensemble des transitions élémentaires précédentes nécessite d’être pris en compte pour décrire les populations du plasma. L’évolution temporelle de la population de chaque niveau de chaque ion est gouvernée par la somme des processus de peuplement et de dépeuplement à partir de ou vers les autres niveaux ou ions :

$$\frac{dN_{Z,i}}{dt} = \left(\sum_{Z',j \neq i} T_{Z'j,Zi} N_{Z',j} \right) - \left(\sum_{Z',j \neq i} T_{Zi,Z'j} \right) N_{Z,i} \quad (1.11)$$

où les $T_{Z'j,Zi}$ sont les taux de transition du niveau j de l’ion Z' vers le niveau i de l’ion Z .

S’il y a état stationnaire, les peuplements et dépeuplements s’équilibrent pour chaque état atomique i : $\frac{dN_{Z,i}}{dt} = 0$. Dans le cas où les évolutions temporelles de la température et de la densité sont lentes, le plasma est appelé quasi-stationnaire, la population des niveaux excités s’équilibrant quasi-instantanément avec celle des états fondamentaux, qui seuls sont décrits de manière instationnaire (typiquement les plasmas nanosecondes, à comparer avec les temps de relaxation ioniques présentés dans le paragraphe 1.2.4).

Enfin, dans le cas des plasmas créés par impulsion laser sub-picoseconde, le plasma est totalement instationnaire et le détail complet de chaque niveau et de ses transitions est nécessaire.

1.3 Caractéristiques et définition des plasmas denses

Intuitivement, la notion de forte densité renvoie à celle de forte pression, de particules comprimées les unes sur les autres, se repoussant, bref, se perturbant mutuellement en permanence. Il est possible, à partir de cette vision naïve, d'appréhender les limites à partir desquelles un plasma peut être qualifié de dense. A cette fin, il suffit de lister l'ensemble des situations qui peuvent conduire à de fortes perturbations. Ceci revient à faire le détail des différentes particules présentes et des causes de leurs répulsions et mouvements les unes vers les autres.

– Les électrons

Ce sont des particules très légères et mobiles. Leur vitesse est caractérisée par leur énergie cinétique moyenne : la température électronique T_e . Leur densité N_e permet de définir le volume disponible par électron comme son inverse $1/N_e$ ainsi que par extrapolation la distance interélectronique moyenne. Lorsque celle-ci s'approche de la longueur d'onde de de Broglie thermique, les électrons ressentent des effets quantiques et la distribution statistique de Maxwell issue de l'équilibre thermodynamique classique ne s'applique plus, elle doit être remplacée par une loi fondée sur une statistique quantique : la distribution de Fermi-Dirac. La température de Fermi $T_F \approx (3\pi^2 N_e)^{2/3}$ est aussi une limite inférieure qui caractérise l'entrée dans ce régime.

– Les ions

Ces particules sont beaucoup plus massives (≈ 1830 fois plus pour l'hydrogène) et leurs vitesses caractérisées par $\sqrt{\frac{T_i}{m_i}}$ est toujours très inférieure à celle des électrons dans les plasmas laser. Il est possible de définir deux dimensions significatives pour les ions : le volume moyen disponible ($1/N_i$) et la distance interionique (R_{ii}) ainsi que le rayon moyen de l'ion qui peut être approximé par celui de l'hydrogénoïde équivalent dans l'état $l = 0$: $\langle r_{i,n} \rangle = \frac{3n^2}{2(Z^* - 1)}$ où n est le nombre quantique principal de l'ion considéré et Z^* son degré d'ionisation.

La force de répulsion ou d'attraction coulombienne est la seule interaction entre ces particules.

Dès lors, un certain nombre de paramètres apparaissent naturellement par comparaison des grandeurs précitées.

- **Le paramètre de couplage de Coulomb** est le rapport de l'énergie potentielle coulombienne d'une particule à son énergie cinétique (à un facteur $2/3$ près) :

$$\Gamma_{ii} = \frac{Z^{*2}/R_{ii}}{T_i} = \left(\frac{4\pi N_i}{3} \right)^{1/3} \frac{Z^{*2}}{T_i}, \quad (1.12)$$

R_{ii} étant la distance interionique. Ce paramètre de couplage peut être étendu à tous les types de particules. $\Gamma \ll 1$ correspond à un plasma idéal : interactions coulombiennes très faibles entre les ions, $\Gamma \geq 1$ à un couplage fort : les effets coulombiens deviennent supérieurs à l'énergie cinétique des particules. Les plasmas fortement couplés sont donc des plasmas denses et plutôt "froids".

- **Le paramètre de dégénérescence** est le rapport de la température de Fermi à celle des électrons :

$$\gamma = \frac{T_F}{T_e} = \frac{(3\pi^2 N_e)^{2/3}}{T_e} \quad (1.13)$$

$\gamma \ll 1$ correspond à un plasma classique, $\gamma \geq 1$ à un plasma où les effets quantiques deviennent importants, les électrons sont alors dits dégénérés.

- **Le rapport entre la taille de l'ion et la distance interionique moyenne.** Murillo et Weisheit [55] considèrent que les fonctions d'onde s'étendent effectivement jusqu'à cinq fois le rayon ionique. Lorsque le rapport de ces deux longueurs est supérieur à 1, les fonctions d'onde des deux ions se superposent et sont notablement perturbées, il n'est plus possible de les affecter à un ion spécifiquement. C'est le phénomène d'ionisation par pression qui limite le nombre de niveaux présents. Notons que cette situation n'est pas spécifique des plasmas denses mais est aussi responsable de la création de bandes d'énergies dans les métaux.
- **Le critère d'influence des électrons libres sur l'atome** qui compare les volumes occupés par les électrons liés (le volume de l'atome) à celui occupé par les électrons libres ($1/N_e$). Si ce rapport dépasse 1, il existe au moins un électron libre présent au sein de la structure ionique, ce qui réduit la liaison entre les liés et le noyau. Ceci conduit au décalage des niveaux, généralement calculé avec un modèle d'écrantage électronique.
Le décalage des niveaux et l'ionisation par pression sont regroupés sous l'appellation générique d'abaissement du continuum.

1.4 Les écrantages

Nous avons jusqu'ici rappelé l'influence de la densité comme une contrainte sur l'équilibre, conditionnant ou non une étude détaillée collisionnelle-radiative. Les modèles utilisés jusqu'ici étaient à particules indépendantes type gaz parfait. Dans

la réalité, les densités élevées font prendre en compte les effets de corrélation entre particules, en particulier l'interaction coulombienne dans les plasmas d'ions multi-chargés. Largement utilisé en astrophysique ou en FCI, l'écrantage des particules chargées par les particules voisines, initialement développé pour des gaz fortement dilués, a été extrapolé à des plasmas beaucoup plus condensés [16].

On ne prétend pas reprendre ici la totalité des multiples travaux existant sur le sujet, mais seulement un certain nombre de ceux qui peuvent permettre de mieux étudier les effets de densité sur les excitations collisionnelles. L'essentiel du calcul de ces dernières (voir le chapitre IV qui leur est consacré) repose sur l'interaction coulombienne entre deux électrons. L'approche la plus simple est donc d'essayer d'évaluer au mieux les potentiels vus par les différentes particules et c'est ce qui explique l'intérêt porté aux écrantages.

1.4.1 Modèle de Debye-Hückel

Dans la limite des faibles densités et hautes températures, l'énergie cinétique moyenne des particules est beaucoup plus importante que leur énergie d'interaction et les effets de corrélation peuvent donc être considérés comme une perturbation par rapport au comportement du gaz parfait.

Dans ces conditions l'énergie cinétique des électrons est très élevée et largement supérieure à la température de Fermi du système, ils peuvent donc être assimilés à des particules classiques. La présence de particules autour d'une charge de référence Z_i modifie le potentiel coulombien et la densité $\tilde{N}_i(r)$ des particules perturbatrices peut être obtenue à l'aide de la statistique de Maxwell-Boltzmann en présence du champ moyen $\Phi(r)$ résultant :

$$\tilde{N}_i(r) = N_i e^{-Z_i \Phi(r)/T} \approx N_i \left(1 - \frac{Z_i \Phi(r)}{T} + \dots \right) \quad (1.14)$$

La linéarisation est justifiée car l'énergie potentielle est très faible devant la température.

De l'équation de Poisson et de la nécessaire neutralité du milieu sans perturbation ($\sum n_i Z_i = 0$) :

$$\nabla^2 \Phi(r) = -4\pi q(r) = -4\pi \sum N_i(r) Z_i \approx -4\pi \frac{\Phi(r)}{T} \sum N_i Z_i^2 \quad (1.15)$$

il se déduit facilement la forme du potentiel autour d'une charge Z :

$$\Phi(r) = \frac{Z}{r} e^{-r/\lambda_D} \quad (1.16)$$

où λ_D est la longueur d'écran de Debye :

$$\lambda_D = \left(\frac{T}{4\pi \sum n_i Z_i^2} \right)^{1/2}, \quad (1.17)$$

la sommation portant sur toutes les espèces ioniques et électroniques.

Enfin, le potentiel chimique de l'espèce i s'écrit :

$$\mu_i = -\frac{Z_i^2}{2\lambda_D} \quad (1.18)$$

et s'obtient en dérivant l'énergie libre par rapport au nombre de particules de cette espèce.

Cette théorie offre l'avantage de présenter une formulation très simple du potentiel mais suppose que le nombre de particules dans la sphère de Debye (le nuage d'écran) est très grand, soit $\lambda_D \gg a$, la distance interparticulaire moyenne, ce qui correspond à $\Gamma Z^{*2} \ll 1$ où Γ est le paramètre de couplage de ces particules. De nombreuses méthodes ont donc été proposées pour étendre son domaine de validité à des couplages plus intenses.

1.4.2 A plus haute densité

La théorie de Debye-Hückel peut être étendue à de plus fortes densités en résolvant l'équation de Boltzmann non linéarisée, ce qui permet d'accéder à des paramètres de couplage de l'ordre de 1/2 mais fait perdre la représentation exponentielle simple du potentiel.

Il existe aussi quelques formules simples pour les situations plus dégénérées : lorsque la distance interélectronique devient de l'ordre de la longueur de de Broglie, la statistique de Maxwell-Boltzmann doit être remplacée par celle de Fermi-Dirac pour la distribution électronique ; la longueur d'écran est (Thomas Fermi linéarisé) :

$$\lambda_{TF} = \left(\frac{\pi}{T^{1/2} I_{-1/2}(\mu/T)} \right)^{1/2} \quad (1.19)$$

où $I_\alpha(x) = \int_0^\infty \frac{y^\alpha dy}{1 + e^{y-x}}$ est l'intégrale de Fermi et μ le potentiel chimique qui s'obtient de manière autocohérente avec la densité électronique (il en existe des valeurs interpolées pour toute température électronique, par ex Dharma-Wardana et Taylor [24]).

De façon plus pratique, à la limite des basses températures, la longueur d'écran Thomas-Fermi à température nulle vaut :

$$\lambda_{TF \ T=0} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{T}{3n_e} \right)^{1/3}} \quad (1.20)$$

Il faut malgré tout noter que tous les modèles avec constante d'écran reposent sur la linéarisation de l'équation de Boltzmann et conservent donc les mêmes limites : une constante de couplage très faible. Toute amélioration passe par la perte de linéarisation des équations et l'accroissement important de la complexité de leurs solutions : elles perdent leur caractère analytique.

Lorsque le plasma est très corrélé : à haute densité et basse température, un modèle d'écrantage couramment employé et de forme analytique simple est celui de la sphère ionique. Dans sa version la plus simple, les électrons libres sont distribués uniformément dans une sphère ayant pour rayon la distance interionique moyenne R_i : $\frac{4\pi}{3}R_i^3 N_i = 1$. Pour la neutralité du milieu, la sphère ionique elle-même est neutre : $\frac{4\pi}{3}R_i^3 N_e = Z^*$ où Z^* est l'ionisation moyenne du plasma et N_e la densité d'électrons libres. Le potentiel résultant autour d'une charge Z est :

$$\begin{aligned} V(r) &= \frac{Z}{r} - \frac{Z}{2R_i} \left(3 - \frac{r^2}{R_i^2} \right)^2 & r \leq R_i \\ &= 0 & r \geq R_i. \end{aligned} \quad (1.21)$$

Ce modèle permet de créer un volume d'exclusion des ions voisins, ce qui est assez compatible avec des calculs de structure spatiale détaillés qui mettent en évidence ce phénomène lorsque le couplage dépasse l'unité.

Toutes ces théories d'écrantage ont été largement utilisées et continuent de l'être pour anticiper les modifications de la structure atomique et des différents taux collisionnels et radiatifs d'un ion plongé dans un milieu dense. Nous présentons par la suite quelques-uns de ces résultats comme références et points de comparaison par rapport à notre étude sur les excitations collisionnelles en présence de microchamp ionique.

1.4.3 Influence sur la position des niveaux

Les calculs portant sur la modification des niveaux et des fonctions d'onde sont nombreux. Concernant les écrantages de Debye-Hückel et de Thomas-Fermi, il n'existe malheureusement pas de formule analytique pour caractériser l'influence de la densité sur les niveaux, sauf pour les écrantages très faibles où l'énergie de liaison des niveaux diminue de $2Z/\lambda$, λ étant la longueur d'écran. Néanmoins, les études numériques (voir par exemple Rogers *et al* [68]) montrent que ce modèle décale et sépare les niveaux des hydrogénoïdes et qu'il induit aussi un décalage des raies vers le rouge lorsque la densité s'accroît.

G. Massacrier [52] a effectué une longue étude en utilisant le modèle de la sphère ionique et propose un résultat simple pour le décalage des niveaux des ions hy-

drogénoïdes :

$$E \approx E_0 + \frac{Z}{2R_i} \left(3 - \frac{\langle r^2 \rangle_{nl}^0}{R_i^2} \right) \quad (1.22)$$

qui semble plus adapté pour la description de plasmas très denses, où $\langle r^2 \rangle_{nl}^0 = \frac{n^2}{2Z^2} [5n^2 + 1 - 3l(l+1)]$ est la moyenne du carré du rayon de l'ion à densité nulle et R_i le rayon de la sphère ionique présenté plus haut.

1.4.4 Ionisation par pression et réduction du nombre de niveaux

Nous avons noté, lors de notre tentative de définition des fortes densités, qu'elles équivalent à rendre comparable le volume disponible par ion ou par électron libre à celui occupé par l'atome étudié.

La trop grande proximité entre deux ions écrête les niveaux supérieurs, qui ne sauraient être physiquement attachés à un atome tout en étant inclus dans le volume d'un autre. Il s'agit de l'ionisation par pression.

De façon similaire, lorsque le volume de l'atome est supérieur au volume disponible par électron libre, il en existe au moins un au coeur de l'atome ; la liaison entre les électrons liés et le noyau est alors écrantée et l'énergie de liaison réduite.

La résultante de ces deux effets conduit à l'abaissement du continuum : la disparition des niveaux les plus excités. Ce processus très important permet, par exemple, de limiter la somme des niveaux dans les fonctions de partition et de les rendre convergentes, ce qui détermine parallèlement le degré d'ionisation moyen du plasma à l'ETL. Il permet aussi de restreindre le domaine de cette étude à des états ioniques pertinents dans des situations HETL.

Dans le cadre du modèle de Debye-Hückel, Rogers *et al* [68] obtiennent numériquement le dernier niveau existant pour un hydrogénoïde : $n_{max} = \sqrt{1.27\lambda_D Z}$, ce qui correspond à la densité de disparition :

$$N_e = 3.32 \cdot 10^{22} T_{(eV)} \frac{Z}{n^4} \text{ cm}^{-3}. \quad (1.23)$$

De son côté, Massacrier propose, dans le cadre du modèle de la sphère ionique :

$$N_e \approx 6 \cdot 10^{22} \frac{Z^4}{n^6} \text{ cm}^{-3}. \quad (1.24)$$

Nous présentons au tableau 1.2 les densités de disparition obtenues par ces formules pour les 4 premiers niveaux de Al XIII :

Dans la mesure où toutes ces densités de disparition atteignent des valeurs extrêmes, il paraît pertinent de retenir celles obtenues avec un modèle de sphère ionique, le modèle de Debye-Hückel étant fondé sur des plasmas chauds et dilués.

| | Debye 100eV | Debye 500 eV | Sphère Ionique |
|-----|---------------------|---------------------|---------------------|
| n=1 | $4.3 \cdot 10^{25}$ | $2.2 \cdot 10^{26}$ | $1.7 \cdot 10^{27}$ |
| n=2 | $1.1 \cdot 10^{25}$ | $5.4 \cdot 10^{25}$ | $2.7 \cdot 10^{25}$ |
| n=3 | $4.8 \cdot 10^{24}$ | $2.4 \cdot 10^{25}$ | $2.3 \cdot 10^{24}$ |
| n=4 | $2.7 \cdot 10^{24}$ | $1.3 \cdot 10^{25}$ | $4.2 \cdot 10^{23}$ |

TAB. 1.2 – Densités de disparition des niveaux de l’Aluminium hydrogénoïde (en cm^{-3}) suivant les modèles d’écrantage.

Massacrier mentionne que cette limite n’est qu’approchée, spectroscopiquement parlant, car de nombreux phénomènes d’élargissement confondent peu à peu les raies entre elles et avec celles du continuum, à mesure qu’elles s’approchent de leur disparition.

B. d’Etat [23], à la suite d’une étude avec deux centres ioniques, note aussi que ces limites de disparition sont très sensibles aux positions des différents ions du plasmas et donc qu’une étude fondée seulement sur des modèles à symétrie sphérique pour les distributions ioniques est forcément limitée.

1.4.5 Influence sur les transitions radiatives

Davis et Blaha [21] ont étudié la transition $2p \rightarrow 1s$ du Néon hydrogénoïde, à l’aide du modèle d’écrantage de Thomas-Fermi, incluant les corrections d’échange et de corrélation de Dharma-Wardana et Taylor. Ils notent, à des densités élevées ($N_e = 6 \cdot 10^{24} cm^{-3}$), que ni la modification des fonctions d’onde ni le décalage des énergies en raison de l’écrantage n’ont d’influence importante sur les taux radiatifs (au plus 15%).

Massacrier étend cette étude à un plus grand nombre de transitions à l’aide de son modèle de sphère ionique. Les transitions dipolaires électriques intra-couche ($n = n'$) se déplacent vers le bleu lorsque la densité croît et leur intensité dépend essentiellement du décalage des niveaux : elle varie donc fortement pour les sous-niveaux hydrogénoïdes initialement dégénérés. Les transitions inter-couche évoluent, elles, vers le rouge, la variation étant dominée par celle du niveau le plus excité. Leur probabilité décroît et ce, de manière importante à la limite de disparition de l’état supérieur. La probabilité de ces transitions est beaucoup plus sensible à la modification des fonctions d’onde qu’à celle des énergies.

1.4.6 Influence sur les transitions collisionnelles

Concernant les transitions collisionnelles, nous allons nous intéresser exclusivement aux excitations collisionnelles électron-ion car elles sont l’objet de cette thèse.

Néanmoins, nombre des constatations faites à leur sujet valent aussi pour les autres transitions.

L'étude initiale des effets de l'écrantage sur les excitations collisionnelles est un travail de Hatton *et al* [38] qui mentionne immédiatement l'ensemble des résultats majeurs de cette approche :

- l'écrantage réduit l'interaction entre l'électron libre et les électrons liés et en conséquence **réduit systématiquement les taux d'excitation**,
- les ondes partielles d'ordre élevé (c'est à dire les électrons libres ayant un grand moment angulaire l) qui ne peuvent sonder que les régions de rayon $r \geq l/k$, sont plus affectées que celles de faible moment angulaire (k est la quantité de mouvement de l'électron),
- en conséquence, **les transitions permises ($\Delta l = \pm 1$), reposant sur des interactions à longue portée, subissent la plus forte réduction de leur force de collision**, car ces dernières sont à convergence lente et de très nombreuses ondes partielles doivent être utilisées dans le calcul.

Son étude repose sur l'approximation de Born et un écrantage de Debye-Hückel.

Whitten *et al* [81] adoptent des méthodes de calcul plus précises (Distorted Waves et Close coupling) en comparant des calculs réalisés avec un écrantage de Debye-Hückel et un modèle de sphère ionique. Ces calculs plus avancés gommant partiellement les lois d'échelle prévues par Hatton mais montrent que les sections efficaces sont très sensibles aux détails de la modélisation de la collision et même plus qu'aux effets plasma dans le cas des transitions interdites. Enfin, l'écrantage dû à la sphère ionique est beaucoup plus important que celui de Debye et les taux de transitions résultants sont approximativement deux fois plus diminués.

Des constatations similaires peuvent être effectuées sur les résultats de Davis et Blaha obtenus avec un modèle d'écrantage affiné (Thomas-Fermi ...) et un calcul Distorted Waves. Néanmoins, les réductions de forces de collision restent faibles, ceci d'autant plus que l'énergie du libre perturbateur est élevée.

Cette remarque est développée par Blancard et Dubau [12] dans une des rares études effectuées sur des ions ayant plusieurs électrons (Fer sodiumoïde) : alors que les excitations collisionnelles sans écrantage sont non nulles au seuil d'excitation, du fait des interactions coulombiennes à longue portée, la discontinuité est gommée dans les modèles avec écrantage et **l'excitation à proximité du seuil est largement réduite**. A l'inverse, à haute énergie, l'écrantage réduit peu les sections efficaces. Par conséquent, **les taux d'excitation collisionnelle**, qui intègrent les sections efficaces sur l'ensemble du spectre des vitesses des électrons libres, **sont d'autant plus réduits que la température est basse et inférieure à l'énergie de seuil de l'excitation**.

Toutes ces études se fondent sur un écrantage global de la cible : noyau et électrons liés créant un potentiel central dont le noyau est l'origine, même pour l'interaction entre l'électron lié et l'électron libre. Gutierrez et Diaz-Valdés [35, 25] montrent que l'asphéricité de l'écrantage pour l'interaction électron-électron conduit à une réduction notable de l'effet d'écran, qui n'apparaît, toujours pour l'écrantage $e^- - e^-$, que pour des longueurs d'écran très courtes, quel que soit le modèle d'écrantage utilisé.

Dans le prolongement de cette remarque, il faut s'interroger sur la pertinence d'un modèle d'écrantage statique qui conserve la même constante d'écran, quelle que soit la vitesse des particules étudiées. Murillo et Weisheit [55], dans une étude récente sur l'ionisation collisionnelle, montrent dans une approche dynamique que l'approximation statique est très restrictive : en effet, si les électrons lents subissent un écrantage statique classique, les électrons libres ou liés (en couche profonde) rapides, beaucoup plus véloce que les électrons du plasma et ne pouvant porter leur propre nuage d'écran, ne voient quasiment aucun écrantage. L'énergie d'oscillation plasma électronique $\hbar\omega_{pe} = \sqrt{\frac{4\pi N_e}{m_e}}$ constitue approximativement une frontière à cet égard.

1.4.7 Pour conclure sur l'écrantage...

Les différents modèles d'écrantage ont fait de nombreux progrès depuis l'approche classique de Debye-Hückel. Ils permettent de couvrir une bonne part de l'ensemble des situations de plasma denses. Les prédictions qui en sont issues sur l'abaissement du continuum ont permis d'améliorer notablement les modèles d'opacité.

Cependant, ils supposent toujours que les potentiels quasi statiques ont une symétrie sphérique. Les ions, dont la vitesse est très faible devant celle des électrons responsables des différentes transitions, produisent de tels potentiels quasi-statiques. Il paraît alors fort peu probable qu'un nombre entier, limité, de ces ions, puisse produire un potentiel à symétrie sphérique. Sans remettre systématiquement en cause les résultats précédents, il semble utile d'étudier les conditions et l'importance des effets de la levée de la sphéricité.

1.5 Influence du Microchamp Ionique

Le traitement des collisions dans un plasma dense par l'écrantage repose sur l'approximation que l'on peut remplacer l'ensemble des situations électrostatiques particulières dues à chaque configuration spatiale des ions ou des électrons par l'in-

teraction produite par la moyenne des distributions possibles. Cette approximation est fondée tant que les temps de collision sont très supérieurs au temps de réponse du plasma et/ou que les fluctuations autour de l'état moyen sont très limitées. Dans la plupart des situations de plasmas chauds et dans l'esprit de la théorie standard de l'élargissement de raies, les collisions doivent intégrer le microchamp \mathcal{E} créé par le plasma et le moment relatif de l'électron libre \mathbf{k} . La fonction de distribution du microchamp reflète toutes les configurations ioniques probables. Ultérieurement, il convient de faire la moyenne des sections efficaces sur les distributions de \mathcal{E} et \mathbf{k} .

1.5.1 Domaine d'application

Il existe deux causes de mouvement pouvant affecter les différentes transitions atomiques :

- **le mouvement collectif d'oscillation des charges** à la suite d'une perturbation électrostatique. Il est caractérisé par la fréquence plasma ω_P . L'inverse de cette fréquence, τ_P , représente donc bien le temps nécessaire pour que les ions ou les électrons effectuent un mouvement collectif, cyclique dans l'espace.

$$\tau_{Pe} = \frac{2\pi}{\omega_{Pe}} = \sqrt{\frac{\pi m_e}{N_e}} \quad \text{pour les électrons,} \quad (1.25)$$

$$\tau_{Pi} = \frac{2\pi}{\omega_{Pi}} = \sqrt{\frac{\pi m_i}{Z^{*2} N_i}} = \sqrt{\frac{\pi m_i}{Z^* N_e}} = \sqrt{\frac{m_i}{Z^* m_e}} \tau_{Pe} \quad \text{pour les ions.} \quad (1.26)$$

- **les fluctuations thermiques** de l'édifice ionique ou électronique dont le temps caractéristique, τ_T , peut être approximé par le rapport de la distance interparticulaire moyenne à la vitesse thermique de ces mêmes particules :

$$\tau_{Te} = \frac{R_e}{\sqrt{T_e/m_e}} = \left(\frac{3}{4\pi N_e} \right)^{1/3} \sqrt{\frac{m_e}{T_e}} \quad \text{pour les électrons,} \quad (1.27)$$

$$\tau_{Ti} = \frac{R_i}{\sqrt{T_i/m_i}} = \left(\frac{3Z^*}{4\pi N_e} \right)^{1/3} \sqrt{\frac{m_i}{T_i}} = Z^{*1/3} \sqrt{\frac{m_i}{m_e} \frac{T_e}{T_i}} \tau_{Te} \quad \text{pour les ions.} \quad (1.28)$$

Remarquons que les temps caractéristiques obtenus pour les électrons sont beaucoup plus brefs que ceux des ions ($\sqrt{\frac{m_i}{m_e}} = 42.8$ pour l'atome d'hydrogène et 223 pour l'Aluminium).

Quant au temps de collision, il peut être considéré comme le rapport de la longueur d'interaction sur la vitesse électronique. La longueur d'interaction peut être simplement assimilée au rayon moyen de l'atome, dans un modèle de sphère dure,

si le potentiel est à courte portée (dans le cas d'un atome neutre). Il est par contre beaucoup plus difficile de la définir pour un ion chargé, le potentiel coulombien étant à longue portée. La longueur d'écran peut en donner une indication dans un modèle écranté.

$$\tau_C \approx \frac{\lambda}{\sqrt{T_e/m_e}}. \quad (1.29)$$

Concernant l'influence des électrons, il est difficile de tirer une conclusion générale. Les temps de collision sont inférieurs aux temps caractéristiques d'oscillation du plasma électronique, quelle que soit la longueur d'écran choisie, mais de moins d'un ordre de grandeur. La condition pour que le temps de collision soit très supérieur au temps caractéristique des fluctuations thermiques revient à ce que la longueur d'écran soit très supérieure à la distance interélectronique moyenne. Dans un plasma très condensé et à fort couplage, le modèle de la sphère ionique est bien adapté car la distance interionique est nécessairement supérieure à la distance interélectronique. Dans le cas opposé (un plasma idéal : $\gamma \ll 1$), la condition pour privilégier l'écrantage de Debye par rapport au microchamp électronique est que la sphère de Debye contienne plusieurs électrons...

Le cas des ions est beaucoup plus clair, leur masse rallongeant considérablement les temps caractéristiques de fluctuation.

$\frac{\tau_C}{\tau_{Pi}}$ vaut respectivement $\frac{1}{\sqrt{Zm_i}} \approx \frac{1}{803}$ pour un écrantage de Debye et vaut environ $\frac{N_e^{1/6}}{T_e^{1/2}} \frac{(3/4\pi)^{1/3}}{\sqrt{\pi m_i Z^{1/6}}} \approx \frac{10^{-3}}{T_e^{1/2} (Ryd)} \left(\frac{N_e (cm^{-3})}{6.76 \cdot 10^{24}} \right)^{1/6}$ (soit $3.9 \cdot 10^{-4}$ si $N_e = 10^{25} cm^{-3}$ et $T_e = 100 eV$) pour un écrantage type sphère ionique, les valeurs numériques étant celles de l'aluminium hydrogénoïde. Le temps de collision est en fait systématiquement très inférieur au temps caractéristique de déplacement collectif des ions dans un plasma même peu condensé (il faudrait $N_e = 2 \cdot 10^{12} cm^{-3}$ pour que ce rapport vaille 1 dans un plasma d'hydrogène ionisé à 1 Rydberg).

La comparaison des temps de collision et du temps de fluctuation thermique ionique mène à une conclusion similaire : leur rapport vaut $\frac{T_i^{1/2}}{N_e^{1/6}} \frac{1}{(4\pi)^{1/6} (3Z)^{1/3} m_i^{1/2}} = \frac{8.7 \cdot 10^{-4} T_i^{1/2}}{(N_e/6.76 \cdot 10^{24})^{1/6}}$ (soit $4.8 \cdot 10^{-2}$ si $T_i = 1 KeV$ et $N_e = 10^{20} cm^{-3}$) pour la sphère de Debye et $\sqrt{\frac{T_i}{T_e m_i}}$ (soit $4.5 \cdot 10^{-3}$ si $T_e = T_i$) pour la sphère ionique.

En conséquence, nous déduisons que l'influence des plasmas denses sur les mécanismes collisionnels sera plus précisément décrite par l'intermédiaire du microchamp ionique et de l'écrantage électronique que par l'écrantage ionique.

1.5.2 Quelques effets connus du microchamp

L'analyse spectrale des gaz ionisés a révélé très tôt des structures ou des profils de raies qu'une théorie exclusivement fondée sur des particules isolées ou écrantées ne permettait pas d'expliquer.

En premier lieu, la présence, même dans des plasmas d'hydrogène faiblement ionisés, de raies interdites ($\Delta l \neq 1$) qui se justifient par le mélange des fonctions d'onde atomiques induit par le microchamp. A titre d'exemple [56], dans le spectre d'émission d'un gaz d'hélium très faiblement ionisé, au voisinage de la raie $4d^3D - 2p^3P^o$ apparaissent les transitions interdites $4f^3F^o - 2p^3P^o$, $5f^3F^o - 2p^3P^o, \dots$ qui ne présentent pas de changement de parité car les fonctions d'onde des niveaux les plus excités sont mélangées.

On note aussi l'éclatement de certaines raies en plusieurs composantes, qui correspond à une levée de dégénérescence des divers sous-niveaux et moments magnétiques d'une même couche, effet particulièrement manifeste sur des ions hydrogénoïdes, dont les niveaux sont totalement dégénérés à l'intérieur d'une même couche. Cet effet de séparation des niveaux a pour conséquence un élargissement des raies spectrales, en raison de la distribution étalée du microchamp. De nombreux travaux ont été publiés ou sont en cours qui concernent l'élargissement Stark des raies [33, 31, 41] et permettent de déterminer plus précisément la température et la densité du plasma en ajustant sur les profils de raies de couche K, obtenus expérimentalement, des profils théoriques calculés pour différentes valeurs de ces paramètres macroscopiques.

Nous présentons dans le paragraphe suivant un autre aspect de l'éclatement des niveaux.

1.5.3 Limite d'Inglis-Teller

Inglis et Teller [42] ont constaté que les plasmas denses présentent des spectres de raies normaux jusqu'à un nombre quantique principal limite, au delà duquel les raies s'estompent et se fondent dans un continuum. Cette limite correspond schématiquement à l'instant où le microchamp ionique moyen, séparant suffisamment les niveaux d'une même couche, amène ses niveaux les plus perturbés à se superposer à ceux de la couche supérieure. Physiquement, les fonctions d'onde de ces divers niveaux se recouvrent et il se forme un continuum d'états quasi-liés, au voisinage de la limite d'ionisation. Cette limite peut être employée pour caractériser la densité ionique par comparaison avec la limite calculée théoriquement.

La limite d'Inglis-Teller, calculée à partir d'un modèle d'écrantage simplifié dans un plasma d'hydrogène très dilué vaut, dans ces conditions :

$$\log_{10} N_i = 23.26 - 7.5 \log_{10} n \quad (1.30)$$

mais peut être extrapolée simplement à des plasmas d'ions plus lourds [4] :

$$\log_{10} N_e = 23.26 + 4 \log_{10} Z^* - 7.5 \log_{10} n. \quad (1.31)$$

La formule présentée ici diffère légèrement de celle de Griem [33] ($4 \log_{10} Z^*$ au lieu de $4.5 \log_{10} Z^*$), cet auteur considérant le microchamp électronique et nous le microchamp ionique. Nous verrons au chapitre suivant que cette limite, calculée dans des conditions de couplage très faible, peut être adaptée à des cas beaucoup plus corrélés.

1.5.4 Influence du microchamp sur les transitions collisionnelles : la recombinaison diélectronique

Il existe très peu d'études portant sur les transitions collisionnelles perturbées par le microchamp ionique, elles portent toutes sur la recombinaison diélectronique. Elles ont par contre été très avancées, en lien avec des études sur les plasmas de fusion magnétique [34, 5, 66, 37]. Les densités y sont très peu élevées, mais la recombinaison diélectronique s'effectue en passant par des états transitoires dont un des électrons est dans un état de Rydberg très excité, il est donc très sensible au moindre champ électrique.

Deux effets orchestrés par le microchamp sont alors en compétition :

- l'ionisation des électrons les moins liés en raison du champ électrique, avant que le système ait pu se stabiliser radiativement. Ceci a pour effet de réduire le nombre de voies possibles pour la recombinaison.
- en l'absence de champ, les états de nombre quantique orbital l élevé ont de faibles taux d'autoionisation et, par le principe de la balance détaillée, de faibles taux de capture. Leur influence sur la recombinaison diélectronique est donc négligeable. Les champs électriques mélangent les l élevés avec les plus faibles qui ont de forts taux d'autoionisation, cela accroît ainsi le nombre d'états participant à la recombinaison diélectronique.

La "redistribution" des voies possibles vers les niveaux moins élevés mais de fort moment orbital est très favorable. Les expériences réalisées donnent désormais des résultats raisonnablement comparables avec la théorie, à savoir un accroissement significatif des taux de recombinaison diélectronique en fonction de la densité [7].

1.6 Conclusion

En résumé, la création de fortes densités ($N_e \leq 10^{24} - 10^{25} \text{cm}^{-3}$) de manière très fugace conduit la matière dans un état hors équilibre thermodynamique qui ne peut être décrit qu'en détaillant l'ensemble des transitions élémentaires qui peuplent le plasma. Or ces densités élevées se définissent aussi par les perturbations qu'elles induisent sur les particules du plasma et par conséquent sur leurs transitions.

La théorie traditionnelle pour représenter l'influence de la densité, l'écrantage, ne peut être valable que pour traiter les perturbations induites par les **électrons libres** et fournit alors d'intéressants résultats sur l'état d'ionisation du plasma... Sur les transitions collisionnelles (électron-ion), l'influence des **ions** (quasi-statiques) ne peut être abordée qu'en faisant des calculs séparés pour diverses valeurs du microchamp ionique. Ce dernier est caractérisé par une fonction de distribution qui permet de réaliser, ensuite, des moyennes.

Le seul mécanisme collisionnel étudié en présence de microchamp, la recombinaison diélectronique, présente des taux de transition significativement accrus lorsque la densité croît, il est par conséquent légitime d'attendre une influence non négligeable de la même perturbation sur les taux d'excitation collisionnelle.

Nous détaillerons dans les parties suivantes le traitement du microchamp, ainsi que son influence sur la structure atomique, l'effet Stark, avant d'en aborder l'impact sur les excitations collisionnelles.

Chapitre 2

Le microchamp ionique

2.1 Introduction

La grande proximité des particules entre elles dans un plasma dense peut modifier considérablement leurs propriétés radiatives ou collisionnelles. Une description microscopique de cet environnement distingue deux types de particules interagissant avec un émetteur. Elles se différencient par leur vitesse et leur masse : les électrons légers et rapides, abordés en général par la théorie des impacts ou des collisions, et les ions perturbateurs supposés quasistatiques durant le temps d'émission ou d'impact électronique.

Le microchamp ionique résulte de la fluctuation thermique de la position des ions autour d'un émetteur particulier. L'énergie totale et la structure atomique de ce dernier s'en trouvent modifiées, avec en particulier le mélange des états propres de l'hamiltonien non perturbé, autorisant du même coup des transitions interdites. La distribution étalée des énergies des niveaux résultante entraîne un élargissement des raies tandis que le mélange des fonctions d'onde de moments orbitaux différents entraîne une variation de la force de la raie. Il en résulte une perturbation importante du spectre d'émission et probablement de la répartition des populations des différents niveaux. Les modifications spectrales par élargissement Stark ont été très étudiées et continuent de l'être (voir par exemple [31, 72]), l'influence du microchamp sur les populations, la troncature des fonctions de partition et plus généralement sur l'ensemble des processus microphysiques de peuplement est un sujet d'étude toujours d'actualité. Il apparaît donc nécessaire de connaître la distribution statistique ou probabilité de distribution du champ $P(\vec{\mathcal{E}})$. Celle-ci se définit comme la probabilité d'observer le champ $\vec{\mathcal{E}}$ au point \mathbf{r}_0 créé par N particules et peut se mettre sous la forme :

$$P(\vec{\mathcal{E}}) = \frac{1}{C} \int e^{-V(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)/kT} \delta(\vec{\mathcal{E}} - \sum_{i=1}^N \vec{\mathcal{E}}_i) d\mathbf{r}^{N+1} \quad (2.1)$$

où $\vec{\mathcal{E}}_i$ est le champ créé au point \mathbf{r}_0 , par la particule i située au point \mathbf{r}_i , V est l'énergie associée à la position et la vitesse des particules les unes par rapport aux autres et C une constante de normalisation.

Il existe de nombreuses théories permettant de calculer cette distribution, diverses par leur approche analytique ou numérique ou encore par leur domaine de validité. D Gilles [30] en discute plusieurs avec précision. Nous nous sommes largement inspiré de son travail pour en présenter un certain nombre, non pas de manière exhaustive, mais essayant de fournir au lecteur quelques références, valables dans des conditions particulières de température et de pression mais d'emploi aisé, ainsi que la méthode de calcul utilisée dans cet ouvrage et dont nous justifierons le choix en la comparant aux autres approches.

2.2 Modèles théoriques

Le champ électrique $\vec{\mathcal{E}}$ créé en un point est le gradient du potentiel généré en ce point par les ions situés à sa proximité. Potentiel qui peut être coulombien ou écranté, de type Yukawa; il sera supposé additif, tout comme le champ, même si cette hypothèse n'est vérifiée que pour des potentiels coulombiens. Les équations caractérisant la distribution du microchamp s'obtiennent par un calcul autoconsistant du hamiltonien total du système à la limite thermodynamique. La résolution exacte de ce système d'équations est celle du problème à N corps et est donc impossible de manière analytique. Il convient donc d'en donner des approximations fondées sur des hypothèses d'environnement (domaine de température, densité...) ou encore d'envisager des simulations numériques pour approcher la réalité. Dans tous les cas, le microchamp sera supposé uniforme ($P(\vec{\mathcal{E}}) = P(\mathcal{E})$) même si dans des conditions de densité très élevée les inhomogénéités du champ ne peuvent plus être omises et devraient conduire à l'introduction d'un gradient du microchamp \mathcal{E} dans la distribution.

On a volontairement exclu les méthodes semi analytiques type APEX ou Dharma-Wardana et Perrot de cette présentation car elles ne sont pas utilisées ici, ainsi que la méthode numérique de dynamique moléculaire, pour la même raison.

Il nous faut mentionner, d'ores et déjà, les limites d'ionisation par champ et d'Inglis-Teller, qui seront étudiées dans le chapitre suivant mais qui requièrent la connaissance, pour l'une de la valeur du champ électrique la plus probable et pour

l'autre la valeur du champ à mi-hauteur de la distribution. Elles seront donc précisées et ces résultats permettront une comparaison des différents modèles.

2.2.1 Définitions et paramètres

On utilise deux paramètres sans dimension pour caractériser le degré de corrélation des particules du plasma :

- le paramètre de corrélation Ion-Ion Γ_{ii} : à un facteur 2/3 près, le rapport de l'énergie coulombienne de 2 ions, situés à la distance interionique moyenne (ou rayon de Wigner-Seitz : r_{ws}), à l'énergie cinétique thermique des ions et qui a déjà été mentionné au chapitre précédent. Il peut varier de plusieurs décades, typiquement $[10^{-5}; 10^2]$.
- le paramètre d'écrantage électronique U_{ie} : rapport de la distance interionique moyenne à la longueur d'écran électronique. Il reste, lui, assez centré $([0.1; 2.5])$:

$$U_{ie} = \frac{r_{ws}}{\lambda_e} = (36\pi)^{1/6} \frac{\bar{Z}^{1/3} N_e^{1/6}}{T_e^{1/2}}. \quad (2.2)$$

Cette expression correspond au cas de l'écrantage électronique de Debye-Hückel.

D. Gilles mentionne que cette longueur d'écran peut s'appliquer au delà de son critère de validité - à savoir un grand nombre de particules dans la sphère de Debye - pour les situations physiques caractéristiques de cette étude, c'est à dire denses et chaudes.

Enfin, une valeur de référence du champ est couramment employée, celle créée par deux ions situés à la distance interionique moyenne :

$$\mathcal{E}_{0i} = \frac{\bar{Z}}{r_{ws}^2} = \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{2/3} \bar{Z}^{1/3} N_e^{2/3} = 7.27 \cdot 10^{-17} \bar{Z}^{1/3} N_e^{2/3} (cm^{-3}). \quad (2.3)$$

Le champ est en général donné dans cette unité et noté β . La fonction de distribution du microchamp électrique s'écrit $P(\beta)$ et est normalisée, le milieu est ionisé mais globalement neutre : $N_e = \bar{Z}N_i$.

Lorsqu'il s'agit de quantifier le champ, la plupart des auteurs choisissent d'employer le $V \cdot cm^{-1}$ ou le *Statvolt* $cm^{-1} = 300V \cdot cm^{-1}$, par cohérence avec le reste de cet exposé nous resterons en Unités Atomiques : $1 \text{ u.a.} = 5.1423 \cdot 10^9 V \cdot cm^{-1} = 1.7141 \cdot 10^7 \text{ Statvolt } cm^{-1}$.

2.2.2 Distribution de Holtsmark

Holtsmark a élaboré dès 1919 une théorie dans le cadre d'un plasma d'hydrogène totalement ionisé et dilué. Il s'applique donc pour un environnement peu ionisé et

non corrélé ($\Gamma_{ii} \rightarrow 0$), par exemple les plasmas de faible densité et forte température. La fonction de distribution s'écrit :

$$P_H(\beta) = \frac{2\beta}{\pi} \int_0^\infty \exp(-y^{3/2}) y \sin(\beta y) dy \quad (2.4)$$

et équivaut à deux expressions approchées aux limites :

$$P_H(\beta) \xrightarrow{\beta \rightarrow 0} 0.4244 \beta^2 \quad (2.5)$$

et

$$P_H(\beta) \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} 1.496\beta^{-5/2} + 7.639\beta^{-4} + 21.60\beta^{-11/2}. \quad (2.6)$$

Le maximum de cette distribution correspond à $\beta = 1.61$ soit un champ le plus probable $\mathcal{E} = 4.18 \bar{Z}^{1/3} N_e^{2/3}$ tandis que la valeur du champ à mi-hauteur de la distribution est $\mathcal{E} = 7.66 \bar{Z}^{1/3} N_e^{2/3}$ ($\beta = 2.95$).

Il convient de noter que cette approche ne convient plus lorsque les corrélations ne sont plus négligeables, la probabilité des grands champs est alors surévaluée.

2.2.3 Distribution Plus Proche Voisin

La méthode PPV (Plus Proche Voisin) ou NN (Nearest Neighbour), est une simplification de celle de Holtsmark en ne prenant en compte pour le calcul du microchamp que l'ion le plus proche. Elle est calculée à l'aide d'un potentiel coulombien non écrané, la position des ions est évaluée de manière statistique :

$$P_{PPV}(\beta) = \frac{3}{2} \beta^{-5/2} e^{-\beta^{-3/2}}. \quad (2.7)$$

La valeur la plus probable du champ est $\beta = \left(\frac{3}{5}\right)^{2/3} = 0.71$ soit $\mathcal{E} = 1.85 \bar{Z}^{1/3} N_e^{2/3}$ et sa valeur à mi hauteur : $\mathcal{E} = 3.78 \bar{Z}^{1/3} N_e^{2/3}$ ($\beta = 1.456$) soit approximativement deux fois celle du champ le plus probable.

Cette distribution, comme celle de Holtsmark, est réservée à des plasmas peu corrélés. Elle gomme la participation des ions plus éloignés au microchamp et le sous-évalue donc lorsque la densité est faible.

2.2.4 Distribution de Mayer

Le modèle de Mayer reprend celui de Holtsmark en incluant un facteur de Boltzmann qui prend en compte les interactions Ion-Ion :

$$P_M(\beta) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \beta^2 \Gamma_{ii}^{3/2} e^{-\beta^2 \Gamma_{ii}/2}. \quad (2.8)$$

Le champ le plus probable vaut $\beta = \sqrt{\frac{2}{\Gamma_{ii}}}$ soit $\mathcal{E} = 2.89 \left(\frac{T_i N_e}{\bar{Z}}\right)^{1/2}$ et sa valeur à mi hauteur : $\mathcal{E} = 4.74 \left(\frac{T_i N_e}{\bar{Z}}\right)^{1/2}$ ($\beta = 1.64 \sqrt{\frac{2}{\Gamma_{ii}}}$).

C'est une approximation bien adaptée aux plasmas denses et froids, très fortement corrélés, où l'écrantage électronique est devenu négligeable, situations obtenues en général pour des matériaux de Z élevé.

2.2.5 Méthode de Monte Carlo

Les distributions employées dans la suite de cet ouvrage sont issues de simulations numériques effectuées par D. Gilles [30]. La technique utilisée consiste en un ensemble d'expériences numériques sur des systèmes finis de particules, en cellules périodiques, à l'intérieur desquelles sont traitées de façon aussi exacte que possible l'ensemble des interactions particulières ainsi que celles avec leurs images dans les cellules limitrophes (méthode de Monte Carlo).

Un lissage analytique a été effectué à partir d'un grand nombre de calculs Monte Carlo représentant une grande diversité de situations possibles. L'expression de la distribution du microchamp est extrapolée à partir d'un ensemble de points issus de ce lissage et obtenus à l'aide de fonctions analytiques simples et de coefficients prétabulés.

Il convient d'ajouter que ce lissage n'est en principe utilisable que pour des plasmas à un seul constituant (constitués d'une seule espèce d'ion de charge égale à \bar{Z}). Ceci convient aux distributions de charge assez piquées autour de \bar{Z} , mais nécessite un aménagement lorsqu'il s'agit de plasmas de type FCI où une impureté lourde (Néon, Argon ionisés en couche K ou encore Krypton) est intégrée dans un microballon rempli d'hydrogène totalement ionisé. D. Gilles mentionne que ses lissages sont toujours fonctionnels, mais avec un \bar{Z} plus élevé, rendu artificiellement plus proche de celui de l'élément le plus lourd. A titre d'exemple, la distribution de microchamp d'un plasma composé d'1% d'Argon hydrogénoïde dans 99% d'hydrogène totalement ionisé est correctement rendue par le lissage en employant $\bar{Z} = 5$, dans des conditions de température et de densité caractéristiques de la FCI. Pour une concentration plus raréfiée (0.2%), le choix $\bar{Z} = 3$ est recommandé.

2.3 Cas pratiques avec la méthode de Monte Carlo

Nous présentons ici quelques situations correspondant à celles étudiées ultérieurement dans cet ouvrage.

Nous avons choisi d'effectuer nos calculs principalement sur l'Aluminium dans le cadre de l'interaction laser matière. Les transitions de couche K y sont communément observées, c'est pourquoi nous avons choisi un $\bar{Z} = 12$ supposant ainsi l'ion quasi hydrogénoïde. Nos calculs d'excitation collisionnelle portent aussi sur les héliumoides mais il apparaît que le choix de $\bar{Z} = 11$ n'a qu'une influence limitée (le champ créé par une particule située à la distance interionique moyenne est proportionnel à $\bar{Z}^{1/3}$, la variation est donc $12^{1/3} - 11^{1/3} \approx 0.065$). Les densités rencontrées atteignent quelques $10^{24}e/cm^3$ (aluminium sous choc) et les températures environ 500 eV, nous avons donc choisi de présenter la distribution du microchamp jusqu'à $N_e = 10^{25}e/cm^3$ et $T_e \approx 600eV$.

Les figures 2.1, 2.3, 2.4 font apparaître une assez bonne corrélation entre le pic de microchamp et la densité, le logarithme de la valeur la plus probable du microchamp étant proportionnel au logarithme de cette dernière pour des densités allant jusqu'à environ $10^{22}e/cm^3$, à 500 eV. Au delà, il y a un affaissement progressif du microchamp en raison des corrélations croissantes.

Il est plus difficile d'établir un comportement général pour la température (figure 2.2). Dans le cas de densités élevées, le comportement est linéaire en température jusque vers 300 eV à $10^{25}e/cm^3$, s'affaissant légèrement ensuite. A plus basse densité, la distribution de microchamp devient quasiment indépendante de la température et voisine de la valeur classique $0.42\mathcal{E}_{0i}$ pour la valeur de champ la plus probable.

Dans toutes les figures présentées ici, la température électronique a été supposée égale à la température ionique. Hors équilibre thermodynamique, cette condition n'est plus vérifiée. Une étude rapide montre une réduction du microchamp si la température ionique décroît (environ un facteur 2 entre $T_i = 100eV$ et $T_i = 500eV$ pour $T_e = 500eV$ et $N_e = 10^{25}e/cm^3$), mais cet effet s'estompe à plus basse densité.

2.4 Comparaisons

Nous avons tracé sur les figures 2.3 et 2.4 les valeurs des paramètres de couplage Γ_{ii} et d'écrantage électronique U_{ie} pour des situations qui encadrent approximativement celles qui seront traitées dans le reste de ce mémoire : un plasma chaud et dense d'Aluminium, de température comprise entre 100 et 500 eV et pour une large gamme de densités au delà de $N_e = 10^{19}cm^{-3}$. Les valeurs de ces paramètres varient notablement autour de l'unité. Nous traçons également les valeurs du champ

le plus probable pour les différentes distributions présentées. Cette comparaison ne dit rien sur la forme des courbes, en particulier aux champs élevés, mais donne une assez bonne indication des champs les plus représentatifs qui seront subis par l'atome excité. Il faut noter que les courbes obtenues pour Holtsmark et PPV sont indépendantes de la température.

Lorsque le plasma est peu corrélé (Γ faible), les approximations de Holtsmark et Plus Proche Voisin encadrent les résultats plus précis obtenus avec la méthode de Monte Carlo, et ces derniers sont d'autant plus proches de ceux de Holtsmark que la température est élevée et que l'on se rapproche donc du domaine de validité de cette théorie, mais en deçà de 500eV, le champ le plus probable de Holtsmark est supérieur d'au moins 50% par rapport à celui de Monte Carlo. La valeur obtenue par PPV reste systématiquement sous-évaluée par rapport à celle de Holtsmark d'un facteur de l'ordre de 2. Le champ le plus probable obtenu par Monte Carlo devient inférieur à cette valeur lorsque le paramètre de couplage Γ_{ii} dépasse 1, ce qui peut constituer une limite approximative à la validité des théories de Holtsmark.

Les résultats issus des distributions de Mayer sont toujours largement surévalués par rapport à ceux de D. Gilles (Monte Carlo) dans le domaine de température et de densité considéré. Le couplage peut y devenir très intense à haute densité, mais l'écrantage y est alors élevé, ce qui est contraire aux conditions d'application de cette théorie. Les résultats deviennent comparables lorsque l'écrantage est faible, mais ces conditions ne sont réunies que pour des \bar{Z} élevés, dans le cas des plasmas chauds et denses. Typiquement, ces conditions sont rencontrées dans des interactions laser-matière avec des métaux lourds, par exemple, l'or de la cavité (Hohlraum) en FCI par voie indirecte. L'ensemble des calculs présentés ultérieurement ne présenteront jamais ces caractéristiques.

Cette étude succincte montre qu'une description approchée du microchamp avec des expressions limites ne couvre qu'une partie étroite du domaine que nous envisageons de traiter et qu'une distribution précise du microchamp est nécessaire.

2.5 Conclusion

En résumé, il apparaît pertinent de choisir une description raffinée de la distribution de microchamp, en particulier lorsque la densité croît et plus encore dans les situations Hors ETL. A plus faible densité, lorsque le paramètre de couplage est très inférieur à 1, la description classique reprend ses droits et il est alors possible d'employer l'expression analytique de Holtsmark. Le choix d'une distribution obtenue par lissage analytique de simulations Monte Carlo, dépendant seulement de deux paramètres, intégrant les 4 variables T_e , T_i , N_e , \bar{Z} permet d'envisager d'extrapoler

les résultats de sections efficaces obtenus pour un élément à l'ensemble des autres, pourvu que l'on choisisse des lois d'échelle adaptées pour ces paramètres.

Les quelques graphiques présentés montrent que des champs électriques atteignant une dizaine d'unités atomiques peuvent exister dans un plasma d'Aluminium très dense et très chaud. Il conviendra donc d'effectuer des calculs de sections efficaces jusqu'à ces valeurs, si tant est que les niveaux calculés existent encore.

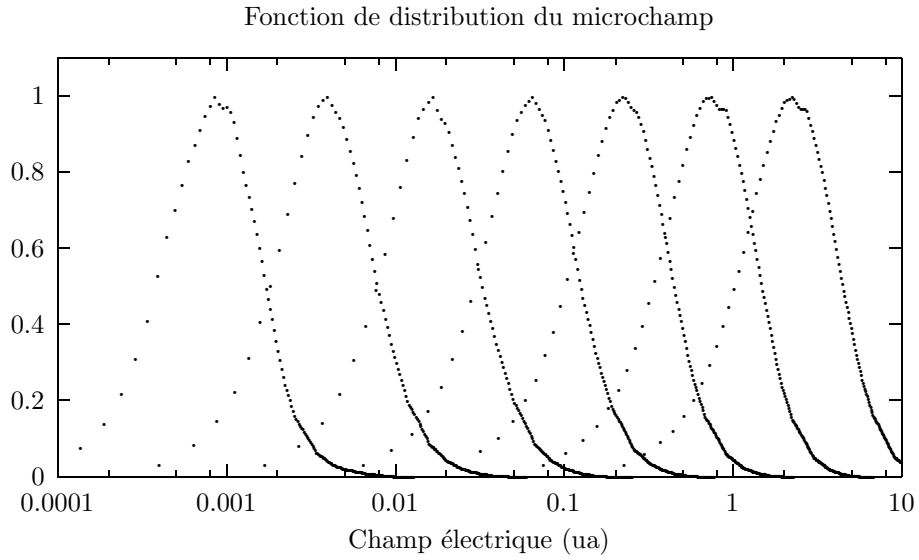


FIG. 2.1 – Distributions du Microchamp électrique créé par un plasma d'Aluminium de $\bar{Z} = 12$ à la température $T_e = T_i = 500\text{eV}$ pour différentes valeurs de la densité (de gauche à droite) : 10^{19} , 10^{20} , 10^{21} , 10^{22} , 10^{23} , 10^{24} et $10^{25}\text{e}/\text{cm}^3$ (les distributions ne sont pas normalisées). Il faut noter que les "légers" accidents autour du maximum reflètent le caractère bruité de la simulation Monte Carlo initiale.

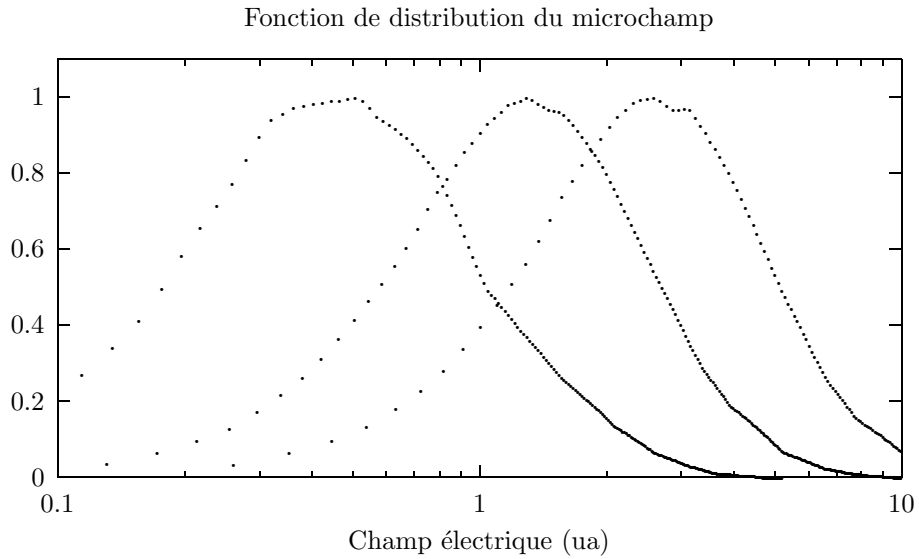


FIG. 2.2 – Distribution du Microchamp électrique créé par un plasma d'Aluminium de $\bar{Z} = 12$ pour une densité $N_e = 10^{25}\text{e}/\text{cm}^3$ et à différentes valeurs de la température (de gauche à droite) : 100, 250 puis 625 eV.

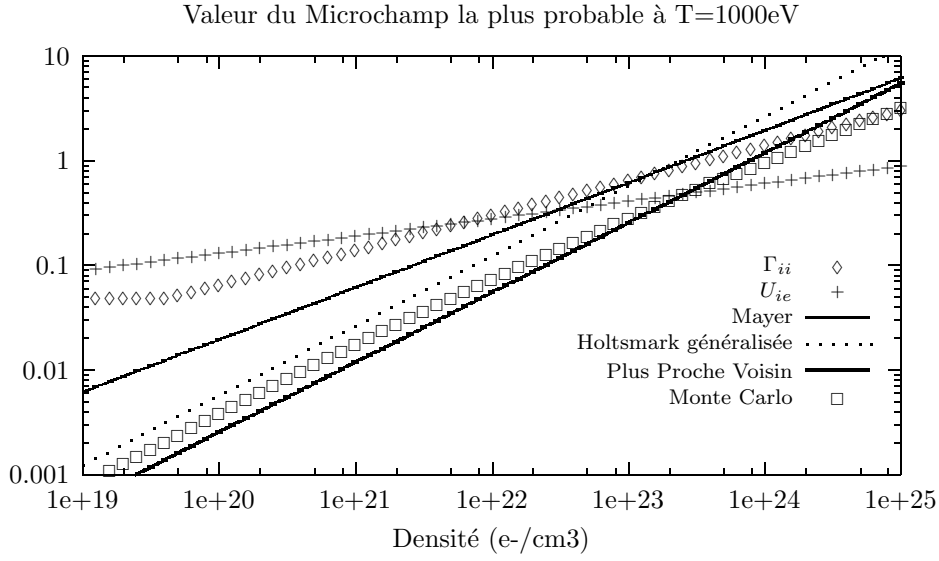


FIG. 2.3 – Champ le plus probable obtenu pour différentes distributions pour un plasma d'Aluminium $\bar{Z} = 12$, à la température $T_e = T_i = 1000\text{ eV}$: distribution de Mayer en trait fin, de Holtsmark en pointillés, distribution Plus Proche Voisin en trait épais et distribution de Monte Carlo en carrés. Les variables Γ_{ii} paramètre de couplage ionique (en losanges) et U_{ie} paramètre d'écrantage électronique (en croix) sont présentées simultanément.

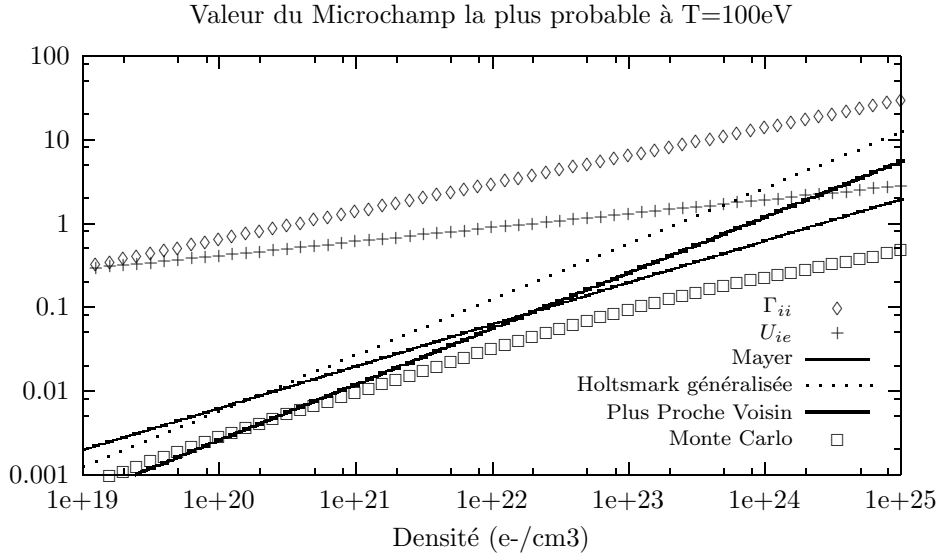


FIG. 2.4 – Même légende que précédemment mais pour $T_e = T_i = 100\text{ eV}$.

Chapitre 3

Influence du champ électrique sur la structure atomique

3.1 Introduction

Nous avons présenté au chapitre précédent l'émergence de champs électriques quasi-statiques, croissants à mesure que le plasma se densifie et/ou voit sa température augmenter ; ces champs étant quasi-statiques à l'échelle des processus collisionnels et radiatifs. La description de ces corpuscules perturbés conduit à modifier leur hamiltonien. Un traitement exact du microchamp et des fonctions d'onde nécessiterait d'en chercher leurs formes en trois dimensions, ce qui n'est guère envisageable, en particulier pour la structure atomique, si l'on espère pouvoir effectuer ensuite des moyennes sur toutes les situations de microchamp et calculer les taux collisionnels qui sont l'objet de cette étude. A titre d'exemple, Ruder *et al* [70] ont calculé l'influence de l'effet Zeeman à fort champ sur divers atomes en employant une base de 300000 fonctions d'onde pour décrire précisément l'asphéricité des fonctions d'onde résultantes. Il est donc nécessaire d'admettre certaines approximations si l'on désire rendre le problème soluble.

Nous supposons le champ uniforme (les gradients possibles, à l'échelle de la structure atomique, sont négligés), comme cela a été mentionné dans les pages précédentes. Ce choix paraît pertinent en comparant la distance interionique moyenne (r_{ws}), caractéristique des domaines de variation du champ, au rayon moyen de l'atome ($\langle r_{at} \rangle = \frac{3n^2 - l(l+1)}{2Z}$ dans le cas d'un hydrogénoïde, n et l étant les nombres quantiques principal et orbital). Ce rapport s'exprime comme un multiple de $Z^{4/3}/N_e^{1/3}$ et, dans le cas d'un plasma de densité $10^{24} e/cm^3$, pour un ion hydrogénoïde excité en couche $n=2$, il vaut environ 6 pour l'Aluminium et 11 pour l'Argon. L'uniformité du champ apparaît donc raisonnable et est supposée avec

profit par la majorité des auteurs car elle permet de reproduire avec une précision correcte les situations expérimentales. Néanmoins, cette approche est plus discutable dans le cas des densités très élevées et des travaux récents ajoutent un gradient à la valeur du champ [22]. Ce raffinement ne sera pas pris en compte ici.

Le champ modifie fortement les fonctions d'onde et transforme leur symétrie sphérique en une symétrie de révolution. Il est possible d'effectuer un changement de référentiel en passant en coordonnées paraboliques [10] pour résoudre le Hamiltonien. Cette approche n'est rigoureusement exacte que dans le cas des ions hydrogénoïdes et nous avons préféré l'éviter pour traiter de façon similaire tous nos ions, en particulier des systèmes multiélectroniques.

Nous rappelons succinctement la théorie nécessaire au calcul avant de détailler les énergies et fonctions d'onde de l'Aluminium hydrogénoïde et héliumoïde pour les états issus des couches $n=2$ et $n=3$, ce qui permettra d'interpréter les modifications des forces de collision présentées au chapitre 5 tout en présentant simultanément les notations spectroscopiques utilisées ultérieurement pour caractériser les niveaux hydrogénoïdes sous microchamp. Puis nous discutons les lois d'échelle en Z , de façon à pouvoir extrapoler plus aisément nos résultats numériques d'excitation collisionnelle à l'ensemble des éléments atomiques. Enfin, nous définissons le domaine de travail en densité par le biais de la limite d'Inglis-Teller, présentée au premier chapitre et recalculée avec le modèle de Monte-Carlo précédent.

3.2 Théorie de l'effet Stark

Nous avons repris les notations utilisées par R. D. Cowan [19] ainsi que, par conséquent, la structure atomique qu'il décrit. Il s'agit d'un couplage LSJ où l'ordre de couplage généalogique est respecté (la sous couche la plus profonde - $1s$ - est la mère de la suivante - $2s$ -, elle-même mère de celle qui lui succède...) :

$$\{ \dots (l_1^{w_1} \alpha_1 L_1 S_1, l_2^{w_2} \alpha_2 L_2 S_2) \mathcal{L}_2 \mathcal{S}_2, l_3^{w_3} \alpha_3 L_3 S_3) \mathcal{L}_3 \mathcal{S}_3, \dots \} \mathcal{L}_q \mathcal{S}_q \mathcal{J}_q \mathcal{M}_q \quad (3.1)$$

où w_i correspond au nombre d'électrons de moments orbitaux l_i dans la sous couche i de moment orbital total L_i et de moment de spin total S_i . Les α représentent les éventuels nombres quantiques supplémentaires (nombre de séniorité...).

3.2.1 Eléments de matrice généraux

L'influence du champ électrique $\vec{\mathcal{E}}$, parallèle à Oz , est prise en compte par un terme d'interaction au niveau de l'Hamiltonien atomique. A l'approximation dipole-

laire, ce terme s'écrit :

$$H_{elec} = -\vec{\mathcal{E}} \cdot \sum_i e\mathbf{r}_i = -\vec{\mathcal{E}} \cdot \mathbf{P}^{(1)} \quad (3.2)$$

où $\mathbf{P}^{(1)}$ est le moment électrique dipolaire de l'atome. L'élément de matrice non diagonal qui s'y rattache s'écrit, en Rydbergs, d'après le théorème de Wigner-Eckart :

$$\begin{aligned} \langle \gamma JM | H_{elec} | \gamma' J' M' \rangle &= -2\mathcal{E} \langle \gamma JM | \mathbf{P}_0^{(1)} | \gamma' J' M' \rangle \\ &= -2\mathcal{E} (-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & 0 & M' \end{pmatrix} \langle \gamma J || \mathbf{P}^{(1)} || \gamma' J' \rangle. \end{aligned} \quad (3.3)$$

L'élément de matrice réduit (indépendant de M) $\langle || \rangle$ se simplifie car l'opérateur de moment dipolaire électrique commute avec le spin :

$$\langle \gamma J || \mathbf{P}^{(1)} || \gamma' J' \rangle = \delta_{S,S'} (-1)^{L+S+J'+1} [J, J']^{1/2} \begin{Bmatrix} L & S & J \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \langle \gamma LS || \mathbf{P}^{(1)} || \gamma' L' S' \rangle. \quad (3.4)$$

Ce dernier élément de matrice est détaillé en appendice pour le cas général. Il contient l'élément de matrice de transition

$$\begin{aligned} P_{nl,n'l'}^{(1)} &= \langle nl || r^{(1)} || n'l' \rangle = \langle l || C^{(1)} || l' \rangle \int_0^\infty P_{nl}(r) P_{n'l'}(r) r dr \\ &= (-1)^l [l, l']^{1/2} \begin{pmatrix} l & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \int_0^\infty P_{nl}(r) P_{n'l'}(r) r dr \end{aligned} \quad (3.5)$$

Le moment angulaire total \vec{J} n'est plus un bon nombre quantique et seule sa projection J_z commute avec le hamiltonien. Dans le cas d'un couplage LSJ pur, le spin commute aussi avec le hamiltonien. De plus, les états γJM et $\gamma' J' M'$ doivent être de parité opposée et donc appartenir à deux configurations différentes.

3.2.2 Cas hydrogénoïde

Dans le cas d'ions à un seul électron, ces éléments de matrice adoptent des formes simples :

$$\langle nlsj || r^{(1)} || n'l'sj' \rangle = \delta_{l',l\pm 1} (-1)^{l_>+j'+3/2} [j, j']^{1/2} (l_>)^{1/2} \begin{Bmatrix} l & s & j \\ j' & 1 & l' \end{Bmatrix} \int_0^\infty P_{nl} P_{n'l'} r dr \quad (3.6)$$

où $l_> = \max(l, l')$, et sans couplage spin-orbite $\mathbf{l.s}$:

$$\begin{aligned} \langle nlm_l m_s | H_{elec} | n'l' m'_l m'_s \rangle &= -2\mathcal{E} \delta_{l',l\pm 1} \delta_{m_l m_s, m'_l m'_s} (-1)^{l_>-m_l} (l_>)^{1/2} \\ &\times \begin{pmatrix} l & 1 & l' \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} \int_0^\infty r P_{nl} P_{n'l'} dr \end{aligned} \quad (3.7)$$

L'effet Stark sépare les états de nombre quantique principal n et initialement dégénérés de [19] :

$$\Delta E = 3nk\mathcal{E}/Z \quad (3.8)$$

où k (à ne pas confondre avec M) prend toutes les valeurs entières de $-(n-1)$ à $n-1$. A mesure que \mathcal{E} grandit, il est nécessaire d'introduire plus de niveaux dans la diagonalisation du hamiltonien et, du fait de l'interdiction de croisement des niveaux de même M , le décalage devenu linéaire retourne dans un état très non linéaire quadratique, puis oscillant par segments.

3.3 Résultats et notation

Pratiquement, nous avons effectué la résolution du hamiltonien pour chaque $|M|$ individuellement, à l'aide d'un programme numérique de diagonalisation pour des matrices comprenant tous les états de la couche $n=2$ (hydrogénoïdes ou héliumoïdes $1s2l$) et pour des matrices comprenant tous les états des couches $n=3$ et 4 . Un tel choix résulte de la très grande séparation des niveaux 2 et 3 et de la petitesse de leurs couplages par le champ.

Nous présentons dans les figures 3.1 à 3.4 des exemples de calculs d'énergies et de fonctions d'onde obtenus pour de l'Aluminium Hydrogéoïde et Héliumoïde. Les énergies initiales sont présentées en appendice et les états initiaux sont supposés en couplage LSJ pur : un état propre $|\beta LSJM\rangle$ de l'Hamiltonien non perturbé vérifie : $H_0|\beta LSJM\rangle = E_{\beta LSJ}|\beta LSJM\rangle$ et un état propre $|\alpha_S M(\mathcal{E})\rangle$ du système ionique en présence de champ : $(H_0 + H_{elec})|\alpha_S M(\mathcal{E})\rangle = E_{\alpha_S M(\mathcal{E})}|\alpha_S M(\mathcal{E})\rangle$.

Le vecteur propre de l'Hamiltonien perturbé est obtenu par la diagonalisation de sa matrice dans la base des états non perturbés :

$$|\alpha_S M(\mathcal{E})\rangle = \sum_{\beta, L, S, J} C_{\beta LSJ}^{\alpha_S M}(\mathcal{E}) |\beta LSJM\rangle. \quad (3.9)$$

Nous appellerons dans les pages suivantes les $C_{\beta LSJ}^{\alpha_S M}(\mathcal{E})$ les **coefficients de mélange** de l'état propre $|\alpha_S M(\mathcal{E})\rangle$.

Pour réduire les temps de calcul des sections efficaces d'excitation collisionnelle présentées aux chapitres suivants, nous avons traité simultanément les états de même $|M|$. Il faut mentionner que les coefficients de mélange de deux états similaires mais de M de signes opposés sont les mêmes en valeur absolue mais peuvent voir leur signe changer. Pour les déterminer, on compare les signes de $\langle \gamma JM | H_{elec} | \gamma' J' M \rangle$ et de $\langle \gamma J - M | H_{elec} | \gamma' J' - M \rangle$.

Dans le cas des hydrogéoïdes, la résolution de l'équation de Dirac-Pauli mène

aux énergies :

$$E_{nlj}(Ryd) = -\frac{Z^2}{n^2} - \frac{\alpha^2 Z^4}{4n^4} \left[\frac{4n}{j + 1/2} - 3 \right] \quad (3.10)$$

où α est la constante de structure fine. La levée de dégénérescence est effectuée sur j , mais **les états de même j et de l différents restent dégénérés. En présence de champ électrique, l'état d'énergie la plus élevée (la plus proche de 0) sera nommé $|nj+>$ et celui d'énergie la plus basse $|nj->$.**

$$|nj+(\mathcal{E}=0)> = \frac{|nlj> + |n(l+1)j>}{\sqrt{2}}, \quad |nj-(\mathcal{E}=0)> = \frac{|nlj> - |n(l+1)j>}{\sqrt{2}}.$$

Le comportement quadratique puis linéaire est bien respecté aux champs faibles pour les hydrogénoïdes (figure 3.1) mais aussi pour les héliumoïdes (figure 3.2). Néanmoins, cette linéarité n'est pas respectée indéfiniment et une étude détaillée fait apparaître des répulsions de niveaux qui correspondent à des échanges de fonctions d'onde (figures 3.1, 3.3 et 3.4). Nous représentons sur ces figures l'anticroisement de $n=4$ $J=3/2$ $M=3/2$ et de $n=3$ $J=5/2$ $M=3/2$ en 3.7 u.a. qui correspond à un échange des deux fonctions d'onde, comme nous l'expliquons dans le cartouche des figures 3.3 et 3.4 même si les deux fonctions d'onde ne se recouvrent pas exactement. Ceci est dû à la progressivité de l'anticroisement qui s'étire approximativement entre 3.3 et 4.1 u.a. . Des anticroisements plus brefs (en terme de champ électrique) existent notamment $n=4$ $J=1/2$ $M=1/2$ et $n=3^2D_{5/2}$ $M=1/2$ en 2 u.a. où les deux fonctions d'onde s'échangent très précisément. Nous avons choisi de ne pas les présenter en raison du très grand nombre de fonctions de base présentes dans les fonctions d'onde (5 pour $n=3$ + 7 pour $n=4$ si $M=1/2$) et préjudiciable à la lisibilité des figures.

Notons que les fonctions d'onde entre deux évitements restent très stables, ce qui permettra de restreindre le nombre d'évaluations des sections efficaces en fonction du champ entre ces points.

3.4 Généralisation

Nous avons vu (formule 3.8) que des lois simples existent pour caractériser les énergies des états en présence de champ. Il est manifeste que ces lois s'exercent tant que les états ne se croisent pas.

En raison du $3j$ présent dans les éléments de matrice d'interaction avec le champ, les déplacements des états sont d'autant plus intenses que $|M|$ est faible. Les états de $|M|$ maximal à l'intérieur d'une couche ne sont pas affectés par le champ.

On peut noter que les intégrales radiales présentes dans les éléments d'interaction sont proportionnelles à $1/Z$ et, donc, que le mélange des états décroît en importance

en $1/Z$ le long d'une séquence isoélectronique. Cowan mentionne que la séparation des niveaux croît au minimum en Z , on en déduit que le mélange des niveaux se fera pour des intensités de champ électrique de plus en plus élevées, de l'ordre de $Z^2 \mathcal{E}_H$.

Les hydrogénoïdes présentent une très bonne régularité en Z tant en énergie que pour leurs fonctions d'onde. Le croisement des couches étant fonction de la loi en $1/Z$ (formule 3.8) et du décalage des couches en Z^2 , les évitements de niveaux et échanges de fonctions d'onde se font à des champs caractérisés par $Z^3 \mathcal{E}_H$. Plus précisément,

$$\mathcal{E} = \frac{Z^3}{3} \frac{2n+1}{n^2(n+1)^2(nk_n - (n+1)k_{n+1})} \quad (3.11)$$

Les énergies des héliumoides correspondent approximativement à celles des hydrogénoïdes avec $Z_{He} = Z - 1$, ceci est d'autant plus vrai que le nombre quantique principal n est élevé. Les transitions se font donc pour des champs $((Z-1)/Z)^3$ fois plus faibles, soit 0.79 dans le cas de l'Aluminium (les anticroisements adviennent vers 2 u.a. et 3.7 u.a. dans la figure 3.1 pour Al XIII et vers 1.6 u.a. et 2.9 u.a. dans la figure 3.2 pour Al XII).

Dans les faits, les croisements prédits sont d'autant plus décalés par rapport à la réalité que le champ est élevé (les transitions mentionnées dans le paragraphe précédent vaudraient 1.98 u.a. et 3.24 u.a. pour Al XIII et 1.56 u.a. et 2.55 u.a. pour Al XII) ce qui signifie que les interactions de $n=3$ avec la couche supérieure $n=4$ ne sont plus négligeables et que la diagonalisation du hamiltonien doit se faire en incluant les états des deux couches.

Nous avons mentionné au premier chapitre un effet spectral dû au microchamp qui restreint la possibilité d'observation des raies issues des niveaux les plus excités en les fondant dans un continuum : la limite d'Inglis-Teller.

3.5 Limite d'Inglis-Teller

Elle correspond à la limite de disparition d'une raie spectrale dans le continuum dans un spectre de raies, ce qui se produit lorsque la largeur de raies de deux couches voisines devient tellement importante qu'elles se recouvrent et qu'il n'est plus possible de les distinguer l'une de l'autre.

Sans que ce soit précisé clairement par Inglis et Teller [42], il apparaît que la largeur choisie est la largeur à mi-hauteur de la raie élargie par un microchamp. Plus Proche Voisin, ce qui correspond au décalage obtenu par le champ à mi-hauteur de la distribution. À l'aide des valeurs du microchamp à mi-hauteur obtenues pour les différentes distributions au chapitre précédent, nous recalculons cette limite. Il est nécessaire de préciser que cette limite n'étant pas définie de manière stricte, les

valeurs numériques proposées par les différents auteurs diffèrent un peu [33].

L'éclatement d'un niveau n en raison du champ électrique a été énoncé en 3.8 et vaut pour les sous-niveaux les plus perturbés : $\Delta E_n^Z = \pm 3n(n-1)\mathcal{E}/Z$. Le rapprochement entre deux couches n et $n+1$ s'écrit donc :

$$|\Delta E_n^Z|_{max} + |\Delta E_{n+1}^Z|_{max} = 6n^2\mathcal{E}/Z \quad (3.12)$$

La séparation entre deux couches non perturbées valant :

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{n+1} &= \frac{Z^2}{n^2} - \frac{Z^2}{(n+1)^2} = \frac{(2n+1)Z^2}{n^2(n+1)^2} \\ &\approx \frac{2Z^2}{n^3} \quad \text{si } n \gg 1 \end{aligned} \quad (3.13)$$

Il y a superposition lorsque ces deux valeurs s'égalisent :

$$n_{max} \approx \left(\frac{Z^3}{3\mathcal{E}} \right)^{1/5} \quad (3.14)$$

Pour une valeur de \mathcal{E} à mi hauteur, on retrouve avec le modèle PPV la limite d'Ingles-Teller (formules 1.30, 1.31) et, pour la distribution de Holtsmark, la limite de disparition se fait à des densités un peu plus élevées :

$$n \geq n_{max}^H \approx Z^{8/15} \left(\frac{6.13 \cdot 10^{22}}{N_e(cm^{-3})} \right)^{2/15}. \quad (3.15)$$

De même que pour l'ionisation par champ, il apparaît sur la figure 3.5 que les densités de disparition obtenues à l'aide d'un microchamp MC sont plus élevées que celles définies précédemment lorsque le couplage grandit et dépasse 1 et tendent vers le même résultat que la formule 3.15 obtenue à l'aide du microchamp de Holtsmark lorsque la température est très élevée et la densité faible.

3.6 Conclusion

Cette partie nous a permis de présenter la théorie employée pour réaliser nos calculs de structure atomique en présence de champ électrique, base des calculs ultérieurs de section efficace d'excitation collisionnelle en présence de microchamp. Les notations utilisées par la suite ont été posées et l'étude des croisements évités de niveaux ainsi que le calcul de la limite d'Ingles-Teller permettent de déterminer les champs électriques en deçà desquels le mélange des différentes couches $n=3$ et $n=4$ n'est pas nécessaire, permettant ainsi une plus grande simplicité de calcul.

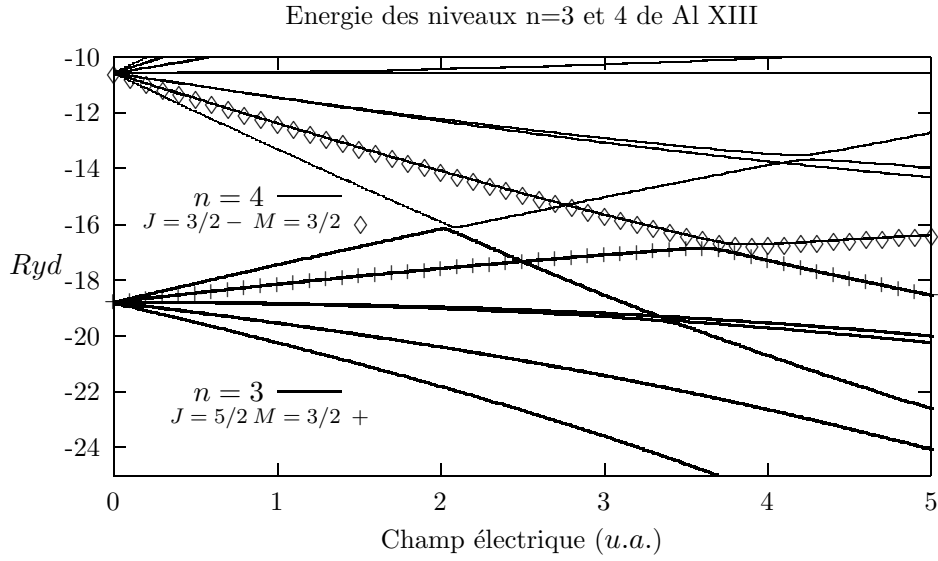


FIG. 3.1 – Energie des différents niveaux issus des couches $n=3$ (en trait fin) et $n=4$ (en trait épais) de l'Aluminium Hydrogénoïde, en fonction du champ électrique. Des croisements évités entre les différents niveaux apparaissent clairement, en particulier entre les niveaux de $n=3$ d'énergie la plus élevée et ceux de $n=4$ d'énergie la plus faible vers 2 u.a. (pour $M=1/2$) et vers 3.7 u.a. (pour $M=3/2$). Les fonctions issues de $n=4$ $J=3/2$ - $M=3/2$ (\diamond) et $n=3$ $J=5/2$ $M=3/2$ (+) sont représentées en superposition.

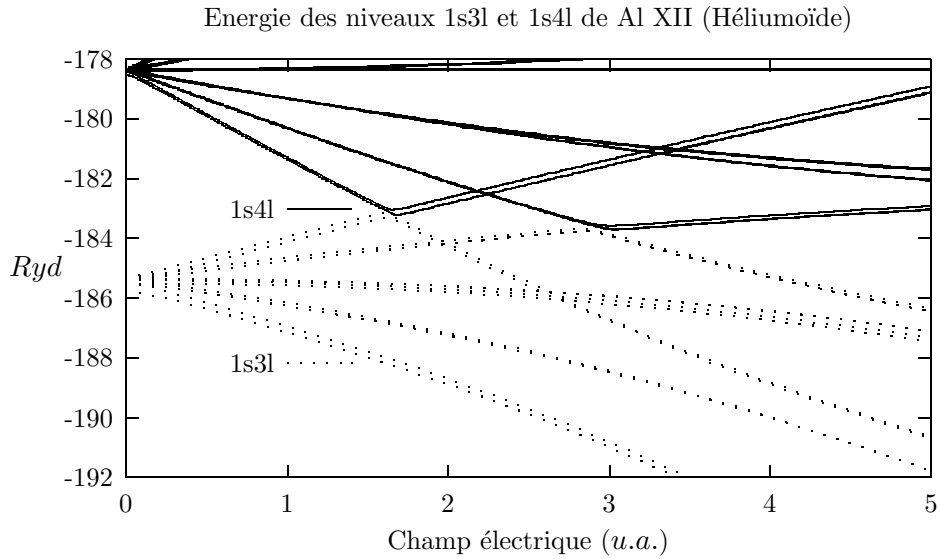


FIG. 3.2 – Energie des différents niveaux issus de $1s3l$ (en pointillé) et $1s4l$ (en trait continu fin) de l'Aluminium Héliumoïde en fonction du champ électrique. Les croisements évités équivalents à ceux de la figure précédente ont lieu vers 1.6 u.a. et 2.9 u.a. L'aspect dédoublé des courbes est dû aux états triplet et singlet de chaque niveau.

Coefficients de mélange de la fonction d'onde issue de $n=4$ $J=3/2$ - $M=3/2$ de Al XIII

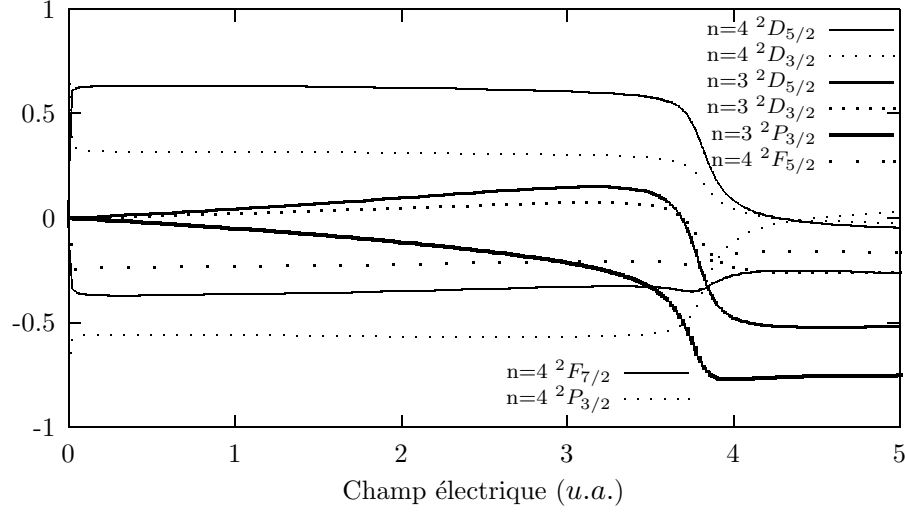


FIG. 3.3 – Coefficients de mélange (au sens de la formule 3.9) de la fonction d'onde issue de $n=4$ $J = 3/2$ -, $M = 1/2$ de l'Aluminium hydrogénoïde, en fonction du champ électrique. La légende en est explicitée sur la figure. L'anticroisement s'effectue autour de 3.7 u.a. En 3.1 u.a., la fonction d'onde vaut approximativement $0.6 n=4^2D_{5/2} - 0.56 n=4^2P_{3/2} - 0.33 n=4^2F_{7/2} + 0.3 n=4^2D_{3/2} - 0.23 n=3^2P_{3/2} + 0.21 n=4^2F_{5/2}$ et en 4.3 u.a., après l'échange avec la fonction d'onde issue de $n=3$ $J = 5/2$, $M = 3/2$, $-0.76 n=3^2P_{3/2} - 0.52 n=3^2D_{5/2} - 0.26 n=3^2D_{3/2} - 0.25 n=4^2F_{7/2}$.

Coefficients de mélange de la fonction d'onde issue de $n=3$ $J=5/2$ $M=3/2$ de Al XIII

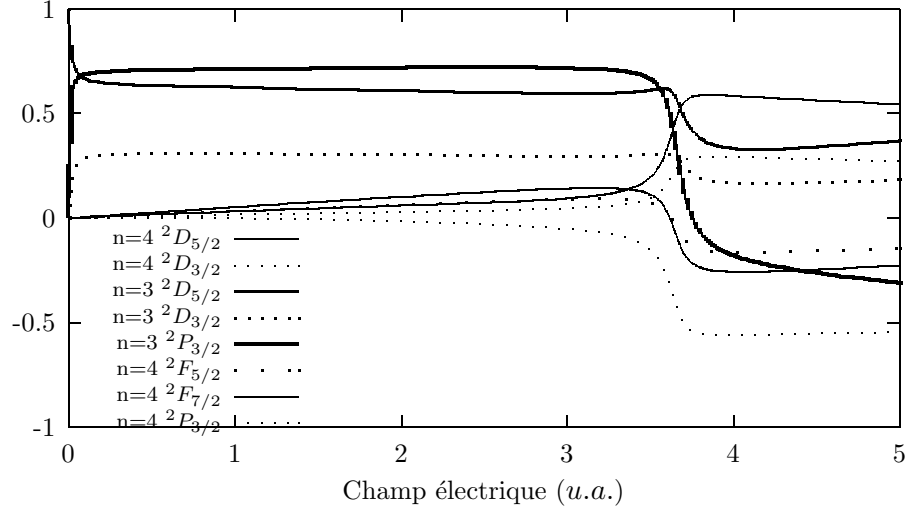


FIG. 3.4 – Coefficients de mélange de la fonction d'onde issue de $n=3$ $J = 5/2$, $M = 1/2$ de l'Aluminium hydrogénoïde, en fonction du champ électrique. La légende, explicitée sur la figure, est la même que dans la figure précédente. L'anticroisement s'effectue autour de 3.7 u.a. En 3.1 u.a., la fonction d'onde vaut approximativement $0.72 n=3^2P_{3/2} + 0.6 n=3^2D_{5/2} + 0.3 n=3^2D_{3/2} + 0.14 n=4^2F_{7/2}$ et en 4.3 u.a., après l'échange avec la fonction d'onde issue de $n=4$ $J = 3/2$ -, $M = 3/2$, $0.57 n=4^2D_{5/2} - 0.55 n=4^2P_{3/2} + 0.33 n=3^2D_{5/2} + 0.29 n=4^2D_{3/2} - 0.25 n=4^2F_{7/2} - 0.24 n=3^2P_{3/2}$.

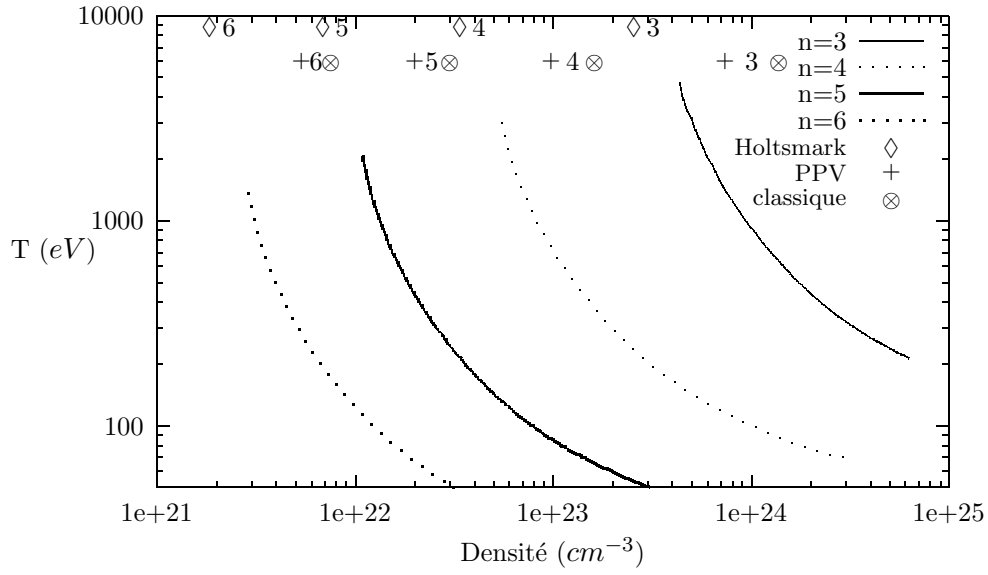


FIG. 3.5 – **Limite d’Inglis-Teller** des différents niveaux de Al XIII calculée avec le microchamp Monte-Carlo en fonction de la densité électronique et de la température ($T = T_e = T_i$), le degré d’ionisation vaut $\bar{Z} = 12$. $n=3$ est en trait continu fin, $n=4$ en pointillé fin, $n=5$ en trait continu épais et $n=6$ en pointillé épais. Les limites calculées à l’aide des formules de Holtsmark et PPV sont indépendantes de la température. Nous calculons la limite à partir de la formule exacte de 3.13 et 3.15 pour le microchamp de Holtsmark (\diamond) et pour le champ Plus Proche Voisin (+) ainsi que la limite classique d’Inglis-Teller (\otimes) (formule 1.31 obtenue à partir de la forme approchée de 3.13 et du microchamp PPV). Le numéro de la couche est indiqué à proximité de chaque sigle.

Chapitre 4

Etude théorique du calcul des sections efficaces et des forces de collision

4.1 Introduction

Les excitations collisionnelles sont un des processus majeurs de peuplement des niveaux en physique des plasmas et font l'objet de nombreuses études pour obtenir des bases exhaustives de sections efficaces concernant les ions qui intéressent en particulier la communauté des astrophysiciens ou encore celle des physiciens de la fusion magnétique et inertielle. Les excitations collisionnelles ne se limitent pas à peupler les niveaux excités des ions, elles jouent aussi un rôle important dans les phénomènes d'ionisation collisionnelle par le biais d'excitations successives [40]. La détermination de leur section efficace est donc une tâche incontournable mais ardue aussi bien expérimentalement que théoriquement.

Pour les plasmas chauds, les expériences ne donnent accès qu'à des résultats globaux qu'il faut ensuite réanalyser pour extraire les taux d'excitations collisionnelle des populations des différents niveaux, elles-mêmes déduites des propriétés radiatives du milieu étudié. Les mesures directes existantes de sections efficaces ne couvrent principalement que les atomes et molécules neutres ainsi que quelques ions faiblement ionisés [82]. L'obtention de résultats concernant des ions moyennement ou fortement ionisés passe donc obligatoirement par une étude théorique.

Une excitation collisionnelle est un processus complexe, même en l'absence de champ électrique. Elle met en jeu un ion, composé d'un noyau et d'au moins un électron lié, et un électron libre. C'est donc un problème à au moins trois corps, non soluble exactement, que ce soit de manière classique ou de manière quantique.

Comme nous l'avons mentionné, de nombreuses équipes travaillent à déterminer, de la façon la plus précise possible, ces sections efficaces et de nombreuses théories et méthodes de calcul ont été élaborées. Henry [39, 40], Sobelman [77], Fano [27] ou encore Carthy et Weigold [15] en font des présentations détaillées. Nous limiterons notre étude aux deux approches envisageables en présence de champ électrique : l'approximation de Born et la méthode Distorted Waves.

Après les avoir présentées, nous détaillerons les différentes méthodes que nous avons essayées pour prendre en compte le microchamp et les comparerons pour justifier notre choix d'une approche Distorted-Waves avec un modèle d'ion en couplage LSJ pur. Nous présenterons simultanément la méthode que nous avons développée pour réduire les temps de calcul des sections efficaces à convergence lente. Enfin, nous expliquerons le fonctionnement du code numérique réalisé. Il calcule de manière autonome les forces de collision de l'ensemble des transitions possibles entre chaque état ($|\gamma M \rangle$) ainsi que les taux collisionnels correspondants. Notre programme est validé par comparaison avec des travaux similaires, hors champ électrique, pour du Fer Héliumöide.

4.2 Principes généraux sur la diffusion

Parmi toutes les réactions possibles qui surviennent lors de collisions entre particules, on nomme *diffusions* celles pour lesquelles l'état final est constitué des mêmes particules que l'état initial.

Lorsqu'il existe un flux incident F_i de particules (nombre de particules par unité de surface et de temps) qui interagit avec un centre diffuseur, le nombre de particules diffusées dans l'angle solide $d\Omega$ autour de la direction (θ, φ) s'écrit :

$$dn = F_i \sigma(\theta, \varphi) d\Omega \quad (4.1)$$

où $\sigma(\theta, \varphi)$ est la *section efficace différentielle de diffusion* dans la direction (θ, φ) . La section efficace totale de diffusion σ est définie par :

$$\sigma = \int \sigma(\theta, \varphi) d\Omega. \quad (4.2)$$

Cette partie étudie les diffusions inélastiques et plus spécifiquement les excitations collisionnelles électron-ion. L'ionisation collisionnelle et la recombinaison diélectro-nique mettent en oeuvre des techniques similaires et peuvent en être extrapolées. Il existe, pour leur calcul, une grande variété de méthodes à la précision croissante mais dont les difficultés théoriques et surtout numériques augmentent notablement. Elles sont présentées successivement.

4.3 Les excitations collisionnelles par la théorie des perturbations

4.3.1 Rappel sur les méthodes perturbatives

La résolution exacte des problèmes de mécanique quantique n'est en général possible que dans des cas très simples et les tentatives de solutions numériques de l'équation de Schrödinger en trois dimensions se heurtent aussi très rapidement aux limites des calculateurs, en particulier lorsqu'il y a plus d'un électron.

Lorsque l'environnement est très légèrement modifié par rapport à une situation microscopique soluble exactement, la théorie des perturbations propose de calculer initialement ces solutions exactes puis de calculer approximativement les corrections qui leur sont imposées par la perturbation [48, 8, 18]. L'une des applications majeures de cette théorie est le calcul des probabilités de transitions collisionnelles ou radiatives dans le spectre continu sous l'influence d'une perturbation constante.

Le système (électron libre + ion, par exemple) est régi par l'équation de Schrödinger :

$$2i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = (H_0 + V(t))\Psi \quad (4.3)$$

où H_0 est le Hamiltonien non perturbé, V le potentiel perturbateur et Ψ la fonction d'onde totale qui peut être développée sur la base des états propres non perturbés :

$$\Psi = \sum_k a_k(t)\psi_k^{(0)}. \quad (4.4)$$

Cette notation est discrète. Si le spectre des états propres est continu :

$$\Psi = \int a_\nu(t)\psi_\nu^{(0)}d\nu. \quad (4.5)$$

Les conditions de normalisation sur les coefficients a_ν sont équivalentes aux précédentes :

$$\sum_k |a_k|^2 = 1 \rightarrow \int |a_\nu|^2 d\nu = 1 \quad (4.6)$$

néanmoins, la normalisation des fonctions propres à l'unité n'est plus possible, elle s'écrit pour le cas continu [48] :

$$\int \psi_{\nu'}\psi_\nu^*dq = \delta(\nu' - \nu) \text{ et } \int \delta(\nu' - \nu)d\nu' = 1. \quad (4.7)$$

Si le système est initialement dans l'état n ($a_k(t=0) = \delta_{kn}$), les coefficients de chaque fonction propre valent au premier ordre $a_{kn}(t) = -i \int \frac{V_{kn}(t')}{2} dt' = -i \int \frac{V_{kn}}{2} e^{i(E_n - E_k)t/2} dt$ où $V_{kn}(t) = \int \psi_k^* V(t) \psi_n d\mathbf{r} = V_{kn} e^{i(E_n - E_k)t/2}$ est l'élément de matrice de perturbation.

La probabilité de transition par unité de temps de l'état initial vers les états compris dans l'intervalle $[\nu_k; \nu_k + d\nu_k]$ vaut :

$$dW_{nk} = \frac{|a_{nk}|^2 d\nu_k}{t} = \pi |V_{nk}|^2 \delta(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) d\nu_k \quad (4.8)$$

si le spectre des états dégénérés est continu sur ν et avec la normalisation 4.7.

4.3.2 La formule de Born

Lorsque les interactions responsables de la diffusion sont assimilables à des perturbations, il est possible d'obtenir des formules simples de sections efficaces à l'aide de la théorie précédente sans effectuer de développement compliqué (i.e. en ondes partielles) des fonctions d'onde (cf. [19, 77]).

Cette méthode est adaptée au cas où les électrons libres sont rapides par rapport aux électrons atomiques (en particulier les électrons mis en jeu dans la transition). Dans cette limite “hautes énergies”, il est possible de négliger les effets d'échange entre l'électron libre et les liés (du fait de la grande différence d'énergie entre les électrons libres et liés, leurs intégrales de recouvrement sont très faibles).

La probabilité d'une transition par excitation collisionnelle entre les états atomiques $\psi_{a_0 M_0}$ et $\psi_{a M}$ associés aux électrons libres $\varphi_{\mathbf{k}_0}$ et $\varphi_{\mathbf{k}}$ respectivement s'écrit au premier ordre de la théorie des perturbations (4.8) :

$$dW = \pi \left| \int \varphi_{\mathbf{k}_i}^*(\mathbf{r}) \left\langle \psi_{a_i M_i} \left| \sum_{i=1}^N \frac{2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} - \frac{2Z}{r} \right| \psi_{a_f M_f} \right\rangle \varphi_{\mathbf{k}_f}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right|^2 \delta(E_i - E_f) d\mathbf{k}_f. \quad (4.9)$$

$E_i = E_{a_i} + k_i^2$ et $E_f = E_{a_f} + k_f^2$ où \mathbf{k}_f est l'impulsion de l'électron libre et la fonction d'onde libre finale, développée en ondes planes, proportionnelle à $e^{i\mathbf{k}_f \mathbf{r}}$ est normalisée par la condition 4.7, ce qui implique que $\varphi_{\mathbf{k}_f}(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}_f \mathbf{r}}$.

D'après la formule 4.1, la section efficace différentielle d'excitation collisionnelle correspond à cette probabilité de transition pour un flux incident d'électrons libres égal à 1 (soit $\varphi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}} / \sqrt{v_i} = k_i^{-1/2} e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}}$).

L'intégration sur \mathbf{k}_f s'effectue en écrivant :

$$\delta(E_f - E_i) d\mathbf{k}_f = \delta(k_f^2 - [k_i^2 + E_{a_i} - E_{a_f}]) \frac{k_f}{2} dk_f^2 d\Omega \quad (4.10)$$

ce qui permet de remplacer ces termes par $\frac{k_f}{2} d\Omega$ où la valeur de k_f est fixée par $k_f = (k_i^2 + E_{a_i} - E_{a_f})^{1/2}$ et la somme sur les états atomiques finaux et la moyenne

sur les états initiaux conduisent à la *formule de Born* :

$$d\sigma^B = \frac{1}{16\pi^2} \frac{k_f}{k_i g_i} \sum_{M_i M_f} \left| \int e^{-i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) \cdot \mathbf{r}} \left\langle \psi_{a_i M_i} \left| \sum_{i=1}^N \frac{2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} - \frac{2Z}{r} \right| \psi_{a_f M_f} \right\rangle d\mathbf{r} \right|^2 d\Omega \quad (4.11)$$

où g_i est le poids statistique de l'état a_i .

Il est possible d'en donner une formulation plus compacte en effectuant l'intégration sur \mathbf{r} qui transforme $d\sigma^B$ en :

$$d\sigma^B = \frac{8\pi}{k_i^2 g_i} \sum_{M_i M_f} \left| \left\langle \psi_{a_i M_i} \left| \sum_{i=1}^N e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} \right| \psi_{a_f M_f} \right\rangle \right|^2 \frac{dq}{q^3} \quad (4.12)$$

où $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$, l'interaction avec le noyau atomique, monoélectronique, s'annulant pour des états atomiques distincts.

Le développement de l'exponentielle complexe [19] :

$$e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} = \sum_{t=0}^{\infty} (2t+1) i^{-t} j_t(qr_i) \sum_{m=-t}^t C_m^{(t)*}(\hat{\mathbf{q}}) \cdot C_m^{(t)}(\hat{\mathbf{r}}_i) \quad (4.13)$$

où $C_m^{(t)}(\hat{q}) = \sqrt{\frac{4\pi}{2t+1}} Y_{tm}(\hat{q})$ est l'harmonique sphérique renormalisée et le théorème de Wigner-Eckart permettent de simplifier la somme en :

$$d\sigma^B = \frac{8\pi}{k_i^2 g_i} \sum_{t=0}^{\infty} (2t+1) < a_i J_i || \sum_i j_t(qr_i) C_i^{(t)} || a_f J_f >^2 \frac{dq}{q^3} \quad (4.14)$$

où l'élément de matrice central peut être séparé en parties angulaire et radiale à l'instar des éléments de matrice électriques multipolaires, seule la partie radiale $< l_i || r^t C^{(t)} || l_f >$ étant modifiée en :

$$< l_i || j_t(qr) C^{(t)} || l_f > = (-1)^{l_i} [l_i, l_f]^{1/2} \begin{pmatrix} l_i & t & l_f \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \int_0^{\infty} P_{l_i}(r) j_t(qr) P_{l_f}(r) dr \quad (4.15)$$

avec l_i et l_f correspondant aux électrons liés actifs dans la transition.

$$d\sigma^B = \frac{8\pi}{k_i^2 g_i} \sum_{t=0}^{\infty} (2t+1) < a_i J_i || C^{(t)} || a_f J_f >^2 \left(\int_0^{\infty} P_{l_i}(r) j_t(qr) P_{l_f}(r) dr \right)^2 \frac{dq}{q^3} \quad (4.16)$$

et la section efficace totale a donc pour expression :

$$\sigma_{a_0 a}^B = \frac{8\pi}{k_i^2 g_i} \sum_{t=0}^{\infty} (2t+1) < a_i J_i || C^{(t)} || a_f J_f >^2 \int_{k_i - k_f}^{k_i + k_f} [R_t(q)]^2 \frac{dq}{q^3} \quad (4.17)$$

où $R_t(q)$ est l'intégrale radiale précédente.

4.3.3 La formule de Bethe

Les valeurs admissibles de t sont contraintes par le 3j de 4.15 : $t = |l_i - l_f|, l_i - l_f + 2, \dots, l_i + l_f$ et correspondent successivement à des interactions électron-atome multipolaires. Il est souvent suffisant de s'en tenir à la multiplicité minimale $t_{min} = |l_i - l_f|$ dans la mesure où les éléments successifs de t dans 4.17 décroissent rapidement. Il n'est pas possible d'en donner une formulation analytique simple, mais un calcul numérique montre, qu'en général, la section efficace multipolaire σ_{t+2} est 5 à 10 fois inférieure à σ_t .

De plus, il est possible de simplifier les fonctions de Bessel au premier ordre du développement :

$$j_t(qr) \xrightarrow{qr \rightarrow 0} \frac{2^t t! q^t}{(2t+1)!} r^t. \quad (4.18)$$

Dans le cas des *transitions dipolaires (i.e. optiquement permises)*, $\Delta l = \pm 1$, $t = 1$, les deux approximations précédentes transforment l'élément de matrice de 4.14 en :

$$\sum_{t=0}^{\infty} [t < a_i J_i || \sum_i j_t(qr_i) C_i^{(t)} || a_f J_f >^2 = \frac{q^2}{3} | < a_i J_i || \sum_i r C_i^{(1)} || a_f J_f >|^2 = \frac{q^2 g}{\Delta E} f_{a_i a_f} \quad (4.19)$$

où $f_{a_i a_f}$ est la force d'oscillateur dipolaire électrique :

$$f_{a_i a_f} = \frac{\Delta E}{3g_i} | < a_i J_i || \sum_i r C_i^{(1)} || a_f J_f >|^2. \quad (4.20)$$

L'approximation résultante s'appelle *formule de Bethe* et s'écrit en unités a_0^2 :

$$\sigma_{a_i a_f}^{Bethe} = \frac{8\pi}{k_i^2 \Delta E} f_{a_i a_f} \ln \left(\frac{k_i + k_f}{k_i - k_f} \right) \approx \frac{8\pi}{E_i \Delta E} f_{a_i a_f} \ln \left(\frac{4E_i}{\Delta E} \right) = \frac{8\pi}{\Delta E^2} f_{a_i a_f} \frac{\ln 4X}{X}$$

(4.21)

à forte énergie ($E_i \gg \Delta E$), X représentant le rapport de l'énergie incidente à énergie de seuil.

4.3.4 Quelques remarques sur les sections efficaces de Born

Un certain nombre de caractéristiques générales sur les sections efficaces de Born (et aussi de Bethe) peuvent être dégagées. Ainsi pour les transitions sans changement de spin ($\Delta S = 0$) :

à forte énergie ($E_i \gg \Delta E$)

- pour les transitions optiquement permises : $\Delta l = \pm 1$, $\sigma^B \propto \frac{\ln E_i}{E_i}$
- pour les transitions interdites optiquement : $\Delta l \neq \pm 1$, $\sigma^B \propto \frac{1}{E_i}$

à faible énergie ($E_i \approx \Delta E$)

$$\sigma^B \propto k_f = \sqrt{E_i - \Delta E}$$

Il faut noter, en outre, la loi d'échelle en fonction de la charge du noyau pour un hydrogénoïde :

$$\sigma_Z = \sigma_H / Z^4. \quad (4.22)$$

Ces formules donnent de bons résultats comparées à l'expérience pour les énergies élevées ($\gtrsim 10\Delta E$) mais se montrent beaucoup plus approximatives en deçà.

Du fait qu'elle ne prend pas en compte l'attraction coulombienne de l'ion, la méthode de Born donne une section efficace nulle à l'énergie du seuil, ce qui reste valable pour un atome neutre mais pas dans le cas d'ions multichargés.

Les limites de cette approximation apparaissent aussi dans son incapacité à traiter des transitions avec changement de spin (d'après l'élément de matrice angulaire de 4.17), à tenir compte de la modification des orbitales libres dans le potentiel de l'ion...

4.3.5 Quelques raffinements possibles

Pour échapper aux limites intrinsèques de l'approximation de Born, tout en conservant l'approche simple de la théorie des perturbations, il existe essentiellement trois axes qui permettent d'améliorer les résultats et les rendre plus conformes à ceux de l'expérience.

- **La distortion des ondes incidentes et sortantes par le champ de l'atome.** L'attraction coulombienne fait croître le flux d'électrons libres à proximité du noyau, ce qui mène à un accroissement notable de la section efficace au seuil de réaction, désormais non nulle. L'approximation la plus simple consiste à perturber l'électron libre par un champ coulombien créé par une charge égale au degré d'ionisation de l'ion et donc à remplacer les fonctions de Bessel par des fonctions de Coulomb dans la formule de Born (approximation Coulomb-Born). L'étape suivante, appelée Distorted Waves (DW), remplace ce champ par le potentiel créé par l'ion.
- La prise en compte des **effets d'échange entre l'électron libre et l'ion.** L'antisymétrisation de l'électron libre avec les électrons liés de l'ion, déjà antisymétrisés, permet de traiter les transitions d'intercombinaison ($\Delta S = 1$).

- **La renormalisation des sections efficaces** pour assurer la conservation du nombre total de particules diffusées. L'approximation de Born suppose que l'ensemble des transitions qui peuvent advenir au cours de la collision sont négligeables devant les diffusions élastiques qui ne modifient pas l'état de l'ion. Il existe néanmoins un certain nombre de "voies" possibles de réactions qui peuvent devenir résonnantes pour une énergie donnée et être extrêmement favorisées au détriment des diffusions élastiques, déséquilibrant ainsi largement le bilan de conservation (par exemple, les transitions autorisées à l'intérieur d'une même couche).

Remarquons que ces effets s'estompent tous à forte énergie, où l'approximation de Born redevient pertinente.

Ces développements ne peuvent être effectués qu'en acceptant un développement en ondes partielles des fonctions d'onde libres, la représentation simple en $\mathbf{q} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i$ n'étant plus utilisable. Nous développons dans le chapitre suivant la méthode que nous avons employée et qui prend en compte distortion des fonctions d'onde libres et échange lors de la collision.

4.4 L'approximation Distorted Waves (DW)

4.4.1 Développement en ondes partielles distordues

Il est possible d'accéder aux équations Distorted Waves par la théorie des perturbations en remplaçant dans la probabilité de transition 4.9 les ondes planes, qui vérifient une équation de Schrödinger sans potentiel perturbateur $((-\nabla - k^2)\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0)$, par des ondes distordues par le potentiel de l'ion émetteur :

$$(-\nabla + 2V(\mathbf{r}) - k^2)\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0. \quad (4.23)$$

Sachant que toute fonction de carré sommable peut être développée sur la base des harmoniques sphériques, nous pouvons écrire pour la fonction d'onde sortante :

$$\varphi_{\mathbf{k}_f}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{k_f} \sum_{l_f, m_f} i_{l_f}^l \frac{F_{l_f}^{k_f}(r)}{r} Y_{l_f m_f}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{l_f m_f}^*(\hat{\mathbf{k}}_f) \quad (4.24)$$

où les fonctions $F_l^k(r)$ vérifient

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2U_{aM}(r) + k^2 \right] F_l^k(r) = 0 \quad (4.25)$$

et dont l'amplitude est prise égale à 1 pour r grand. On montre qu'avec ces coefficients, la fonction d'onde finale atteint bien la condition de normalisation requise : $\langle \varphi_{\mathbf{k}_f}(\mathbf{r}) | \varphi_{\mathbf{k}'_f}(\mathbf{r}) \rangle = \delta(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}'_f)$. (Voir la formule 18.26 de la référence [19](Cowan) :

$\int F_l^k F_l^{k'} dr = \pi \sqrt{E} \delta(E - E')$, $\delta(E - E') = \delta(k - k')/2k$ et la formule VI D.26 de la référence [18] (Cohen-Tannoudji) : $\sum_{lm} Y_{lm}(\hat{\mathbf{k}}) Y_{lm}(\hat{\mathbf{k}}') = \delta(\theta_k - \theta_{k'}) \delta(\phi_k - \phi_{k'}) / \sin \theta_k$.

La section efficace différentielle d'excitation collisionnelle s'obtient à partir de la probabilité de transition 4.9 lorsque le flux d'électrons incidents est unitaire. En remarquant que les ondes planes incidente ($e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}} / \sqrt{k_i}$) et sortante ($e^{i\mathbf{k}_f \mathbf{r}} / (2\pi)^{3/2}$) diffèrent d'un facteur $\frac{(2\pi)^{3/2}}{\sqrt{k_i}}$ tout en admettant le même développement 4.13 que les ondes distordues :

$$\frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_l \frac{i^l}{k} \frac{kr j_l(kr)}{r} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{k}}) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (4.26)$$

où $kr j_l(kr)$ a aussi une amplitude de 1 aux r grands, nous pouvons écrire la fonction d'onde distordue entrante :

$$\varphi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) = \frac{4\pi}{k_i^{3/2}} \sum_{l_i m_i} i^{l_i} \frac{F_{l_i}^{k_i}(r)}{r} Y_{l_i m_i}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{l_i m_i}^*(\hat{\mathbf{k}}_i) \quad (4.27)$$

où $F_{l_i}^{k_i}$ est normalisée à 1 à l'infini et vérifie la même équation différentielle 4.25 que $F_{l_f}^{k_f}$ avec $U_{a_i M_i}(r)$ et k_i^2 .

La moyenne sur l'angle d'incidence de l'électron libre initial et la somme sur celui de l'électron sortant simplifient les harmoniques sphériques dépendantes de $\hat{\mathbf{k}}_f$ et $\hat{\mathbf{k}}_i$ apparues dans $d\sigma$:

$$\int \frac{d\Omega_i}{4\pi} \int d\Omega_f Y_{l_f m_f}(\hat{\mathbf{k}}_f) Y_{l'_f m'_f}^*(\hat{\mathbf{k}}_f) Y_{l_i m_i}^*(\hat{\mathbf{k}}_i) Y_{l'_i m'_i}(\hat{\mathbf{k}}_i) = \frac{1}{4\pi} \delta_{l_f l'_f} \delta_{m_f m'_f} \delta_{l_i l'_i} \delta_{m_i m'_i} \quad (4.28)$$

et mènent à la section efficace :

$$\sigma_{a_i M_i m_i^s, a_f M_f m_f^s} = \frac{4\pi}{k_f k_i^3} \sum_{l_f, m_f, l_i, m_i} \left| \int \frac{F_{l_i}^{k_i}}{r} Y_{l_i m_i}^* \left\langle \psi_{a_i M_i} \left| \sum_{i=1}^N \frac{2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} - \frac{2Z}{r} \right| \psi_{a_f M_f} \right\rangle \frac{F_{l_f}^{k_f}}{r} Y_{l_f m_f} d\mathbf{r} \right|^2 \quad (4.29)$$

où m_i^s et m_f^s représentent les spins des électrons libres.

Nous allons donner une autre forme à cette section efficace de manière à fournir au paragraphe suivant une formule très simple de la force de collision. Les fonctions $F_{l_i}^{k_i}$ et $F_{l_f}^{k_f}$ sont normalisées à 1 à l'infini, nous les renormalisons à $k_i^{-1/2}$ et $k_f^{-1/2}$ et multiplions donc la formule précédente par $k_f k_i$, moyennons le spin de l'électron

incident et sommions le spin de l'électron libre final :

$$\sigma_{a_i M_i, a_f M_f} = \frac{2\pi}{k_i^2} \sum_{l_i m_i m_i^s}^{l_f m_f m_f^s} \left| \left\langle \Psi_{a_i M_i, k_i l_i m_i m_i^s} \left| V_{\text{interaction}} \right| \Psi_{a_f M_f, k_f l_f m_f m_f^s} \right\rangle \right|^2 \quad (4.30)$$

où $\left\langle \Psi_{a_i M_i, k_i l_i m_i m_i^s} \left| V_{\text{interaction}} \right| \Psi_{a_f M_f, k_f l_f m_f m_f^s} \right\rangle$ représente l'élément de matrice d'interaction de 4.29 entre les systèmes initial Ψ_i et final Ψ_f composés de l'onde partielle $\frac{F_l^k}{r} Y_{lm} \delta_{m^s}$ et de l'ion ψ_{aM} antisymétrisés.

En toute rigueur, il est possible d'établir les formules de section efficace DW précédentes à l'aide des équations Close Coupling, plus générales et rigoureuses [73, 74, 77, 28], et non plus par la voie perturbative précédente. En résumé, la méthode Close Coupling établit un système intégral-différentiel complet soluble de manière itérative pour le calcul des états du système ion-électron. Le nombre des états possibles est variable mais peut comprendre ceux résultant de réactions "parasites" telles l'ionisation collisionnelle, l'effet Auger ou encore la création de complexes temporaires... Des temps de calcul prohibitifs et une grande complexité de programmation sont les coûts induits par la grande précision de cette méthode. L'approche DW les réduit drastiquement en supposant que le couplage entre tous les différents états possibles est très faible, ce qui permet de réduire le nombre de canaux de réaction à 2 [67, 54, 75]. La précision reste très acceptable, en particulier pour les ions multichargés [82, 39, 36].

Notre approche correspond à celle développée par Pindzola [63, 11] et Peyrusse [61], sans effets relativistes ni états atomiques multiconfigurationnels (mais ces derniers apparaissent lorsque nous superposons le champ électrique dans la partie suivante) ni normalisation des sections efficaces, mais comprenant les effets d'échange ainsi que deux potentiels distincts (V_{a_i} et V_{a_f}) pour la distortion des électrons incident et sortant. Notre choix de cette méthode a été déterminé par son usage fréquent, sa mise en oeuvre relativement simple et plus précisément, par souci de cohérence avec le code Collisionnel Radiatif de O. Peyrusse : TRANSPEC [59, 60] qui permettra d'observer les effets spectraux induits par la modification de ces sections efficaces due au microchamp.

4.4.2 Forces de collision Ω

Une quantité sans dimension nommée **force de collision** peut être utilisée à la place de la section efficace :

$$\Omega_{if} = \frac{g_i k_i^2}{\pi} \sigma_{if} \quad (4.31)$$

où g_i correspond à la dégénérescence du niveau initial. Elle a l'avantage d'être symétrique par rapport aux processus direct et inverse (excitation et désexcitation) :

$$\Omega_{if}(k_i, k_f) = \Omega_{fi}(k_f, k_i), \quad (4.32)$$

est additive en regard des différents niveaux atomiques ($\Omega_{aa'} = \sum_{MM'} \Omega_{aM, a'M'}$ par exemple), enfin, à forte énergie, en raison de ce qui a été noté sur les sections efficaces de Born au paragraphe 4.3.4, elle est quasi indépendante de k_i et k_f (pour les transitions interdites optiquement) ou croît lentement (logarithmiquement) (transitions optiquement permises).

$$\Omega_{if} = 2 \sum_{l_i m_i m_i^s, l_f m_f m_f^s} \left| \int \phi_i V_{ij} \phi_j d\mathbf{r} \right|^2 \quad (4.33)$$

où $\int \phi_i V_{ij} \phi_j$ représente les éléments de matrice diélectroniques antisymétrisés, aussi notés $\langle \psi_{a_i M_i} \phi_i(k_i, l_i) | \sum_{k < l}^{N+1} \frac{2}{r_{kl}} | \psi_{a_f M_f} \phi_f(k_f, l_f) \rangle$ où les ϕ représentent les ondes partielles $\frac{F^k}{r} Y_{lm} \delta_{m^s}$. Les termes d'interaction électron-noyau sont monoélectroniques et s'annulent donc car l'ion et l'électron libre sont tous deux différents entre l'état initial et l'état final.

4.4.3 Calcul des éléments de matrice diélectroniques

Le résultat précédent ne présente aucun couplage entre l'électron libre et l'ion ou bien de couplage spin orbite ou LS de l'ion. Dans la réalité, on cherche à déterminer des forces de collision entre niveaux atomiques de moments cinétiques totaux J_i, J_f bien spécifiés. Elles s'obtiennent en utilisant les coefficients de Clebsch-Gordan et leurs propriétés :

$$|j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle = \sum_{jm} C(j_1 j_2 m_1 m_2; jm) |j_1 j_2 jm \rangle \quad (4.34)$$

et

$$\sum_{m_1 m_2} C(j_1 j_2 m_1 m_2; jm) C(j_1 j_2 m_1 m_2; j' m') = \delta_{j, j'} \delta_{m, m'}. \quad (4.35)$$

Ce qui donne simplement pour les électrons libres :

$$\Omega_{if} = 2 \sum_{j_i m_i, j_f m_f} | \langle \psi_{a_i} \phi_i(l_i j_i m_i) | \sum_{k < l}^{N+1} \frac{1}{r_{kl}} | \psi_{a_f} \phi_f(l_f j_f m_f) \rangle |^2 \quad (4.36)$$

et dans le cas où le calcul est effectué sur tous les moments magnétiques de l'atome :

$$\Omega_{if} = 2 \sum_{j_i j_f J} (2J+1) | \langle \Phi_{J_i} \phi_{j_i} J M | \sum_{k < l}^{N+1} \frac{1}{r_{kl}} | \Phi_{J_f} \phi_{j_f} J M \rangle |^2, \quad (4.37)$$

les éléments de matrice étant présentés en détail dans l'appendice D. Les sommes sur les moments cinétiques totaux des électrons libres j_i et j_f contiennent implicitement les sommes sur les moments orbitaux $l_i = j_i \pm 1/2$ et $l_f = j_f \pm 1/2$.

Dans le cas où l'on ne considère pas des transitions détaillées mais des transitions totales entre configurations $n_1 l_1^{w_1} n_\alpha l_\alpha^{w_\alpha} n_\beta l_\beta^{w_\beta-1} n_N l_N^{w_N}$ et $n_1 l_1^{w_1} n_\alpha l_\alpha^{w_\alpha-1} n_\beta l_\beta^{w_\beta} n_N l_N^{w_N}$, Pindzola [63] et Peyrusse [61] donnent une version plus pratique des forces de collision à partir de la formule 4.33 et en décomposant le système électronique en déterminants de Slater (chaque électron est affecté de nombres quantiques bien déterminés $l m m^s$). Leurs formules très générales se retrouvent simplement pour des transitions dans des alcalins (un seul électron appartenant à une couche non complète). Nous nous y restreindrons, les formules que nous établissons ultérieurement pour des transitions en présence de champ électrique à l'aide de cette formule n'étant valables que pour ces configurations électroniques.

$$\Omega_{if} = 8 \sum_{l_i l_f k} \frac{1}{2k+1} \left[(Q_{\alpha i, \beta f}^{(k)})^2 + (Q_{\alpha i, f \beta}^{(k)})^2 - Q_{\alpha i, \beta f}^{(k)} P_{\alpha i, f \beta}^{(k)} \right] \quad (4.38)$$

où

$$Q_{\alpha i, \beta f}^{(k)} = R_{\alpha i, \beta f}^{(k)} < c l_\alpha || C^{(k)} || c' l_\beta > < c l_i || C^{(k)} || c' l_f >, \quad (4.39)$$

$$Q_{\alpha i, f \beta}^{(k)} = R_{\alpha i, f \beta}^{(k)} < c l_\alpha || C^{(k)} || c' l_f > < c l_i || C^{(k)} || c' l_\beta >, \quad (4.40)$$

$$P_{\alpha i, f \beta}^{(k)} = (2k+1) \sum_{k'} (-1)^{k+k'} Q_{\alpha i, f \beta}^{(k')} \left\{ \begin{matrix} l_\alpha & l_\beta & k \\ l_i & l_f & k' \end{matrix} \right\}, \quad (4.41)$$

$R^{(k)}$ est l'intégrale radiale double classique sur les orbitales radiales P :

$$R_{ij, tu}^{(k)} = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_{\leq}^k}{r_{>}^{k+1}} P_i(r_1) P_j(r_2) P_t(r_1) P_U(r_2) dr_1 dr_2 \quad (4.42)$$

et

$$\langle cl_i || C^{(k)} || c'l_f \rangle = (-1)^{l_i} [l_i, l_f]^{1/2} \begin{pmatrix} l_i & k & l_f \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.43)$$

où $[l] = 2l + 1$.

Diverses méthodes existent pour la détermination numérique des fonctions d'onde libres, plusieurs sont proposées par C. Froese-Fischer [29] et de plus récentes ont été développées, en particulier par Sapirstein *et al* [71], qui emploient des fonctions splines, ou encore l'approche Phase-Amplitude de Bar-Shalom [6].

La voie choisie ici est une intégration par la méthode de Numerov avec un pas exponentiel puis arithmétique pour s'accorder avec les codes ATHF (Hartree-Fock) et ATKS (Kohn-Sham) de Perrot [57] (énergie moyennée sur une configuration) qui ont fourni la base des fonctions atomiques numériques de ces travaux ; son détail est fourni dans l'appendice C

4.4.4 Orthogonalisation des fonctions d'onde libres dans les intégrales d'échange

Les fonctions d'onde monoélectroniques sont évaluées dans un potentiel autoconsistant par le code Hartree-Fock de Perrot, elles sont donc orthogonales entre elles et avec les fonctions d'onde libres calculées à partir de ce potentiel. Néanmoins, dans le cas des hydrogénoïdes, si les fonctions d'onde liées sont purement hydrogéniques et les fonctions d'onde libres sont calculées dans le potentiel total de l'ion (noyau + électron lié), ces fonctions d'onde ne sont plus orthogonales entre elles (l'une calculée dans un potentiel en Z/r , l'autre, dans un potentiel en $(Z - 1)/r$ pour r grand). Ceci induit une forte erreur numérique dans le calcul des intégrales radiales d'échange (mais qui se réduit à mesure que l'état de charge - Z - croît). L'orthogonalité est assurée pour des orbitales de l_{at} et l_i distincts par les parties angulaires ; dans le cas contraire, il est possible d'y remédier par une orthogonalisation au premier ordre dans les intégrales d'échange concernées :

$$\tilde{\phi}_{l_i} = \phi_{l_i} - \langle \phi_{l_i} | P_{L_f} \rangle . P_{L_f} . \delta_{l_i L_f}, \quad (4.44)$$

$$\tilde{\phi}_{l_f} = \phi_{l_f} - \langle \phi_{l_f} | P_{L_i} \rangle . P_{L_i} . \delta_{l_f L_i}. \quad (4.45)$$

L'intégrale d'échange s'écrit :

$$R_{exchange}^{(k)} = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_{\leq}^k}{r_{>}^{k+1}} P_i(r_1) \tilde{\phi}_i(r_2) \tilde{\phi}_f(r_1) P_f(r_2) dr_1 dr_2. \quad (4.46)$$

4.5 Excitations collisionnelles en présence de champ électrique

En présence de champ électrique, les forces de collisions précédentes doivent être recalculées. Nous présentons dans les paragraphes qui suivent le seul modèle réalisé jusqu'ici ainsi que les deux que nous avons essayés, avant de les comparer.

Mentionnons que, dans tous les cas présentés, **l'axe de référence, pour caractériser la direction de l'impulsion des électrons libres comme pour la projection des moments cinétiques totaux, est l'axe du champ électrique.**

4.5.1 Etudes antérieures

Quelques travaux sur les mécanismes collisionnels en présence de champ ont déjà été présentés dans la littérature. Ils concernent essentiellement le phénomène de Recombinaison Diélectronique, très affecté par la présence de champs électriques, même modestes, car ce processus engage des niveaux peu liés et donc de nombre quantique principal n élevé, extrêmement sensibles à toute perturbation.

Des études théoriques ont été présentées dès 1976 [43] suivies en 1983 par des comparaisons expérimentales [9]. Elles se continuent et semblent de plus en plus cohérentes [5, 7, 66]. De manière plus récente ont commencé des études portant sur d'autres mécanismes collisionnels dont les excitations électron-ion. A notre connaissance, l'étude de F. Perrot (1988)[58] dans le cas du Néon hydrogénoïde, pionnière dans ce domaine, suivie en 1996 par un travail plus général de Krstić et Hahn [47] sur l'ensemble des mécanismes radiatifs et collisionnels sont restées isolées.

Le calcul de Perrot était prospectif et cherchait essentiellement à donner un ordre de grandeur de l'influence du microchamp sur les sections efficaces d'excitation collisionnelles. Le modèle est une **approximation de Born** adaptée à l'ion **monoélectronique du Néon** dont le Hamiltonien d'interaction prend en compte **effet Stark et écrantage statique de Debye-Hückel** en suivant le modèle de Hatton [38] ;

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\frac{Z}{r_1} e^{-r_1/\lambda_D} - \mathcal{E}z_1 + \frac{1}{r_{12}} e^{-r_{12}/\lambda_D} \quad (4.47)$$

L'amplitude de diffusion de Born se simplifie :

$$\begin{aligned} f_{if}(\hat{k}_i, \hat{k}_f) &= -\frac{1}{4\pi} \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 e^{i(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r}_1} U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Psi_f^*(\mathbf{r}_2) \Psi_i(\mathbf{r}_2) \\ &= -\int d\mathbf{r}_2 \Psi_f^*(\mathbf{r}_2) \Psi_i(\mathbf{r}_2) \frac{e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_2}}{K^2 + \lambda_D^2} \end{aligned} \quad (4.48)$$

où K représente la différence d'impulsion entre l'électron incident et l'électron libre final : $\mathbf{K} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$ sachant que l'énergie totale du système est conservée : $k_i^2/2 + E_i =$

$k_f^2/2 + E_f$. Finalement, le développement des états perturbés sur la base des états propres non perturbés :

$$\Psi_{im}(\mathbf{r}) = \sum_{n,l} a_{nl}^{im}(\mathcal{E}) R_{nl}(r) Y_l^m(\hat{r}) \quad (4.49)$$

$$\Psi_{f\mu}(\mathbf{r}) = \sum_{\nu,\lambda} a_{\nu\lambda}^{f\mu}(\mathcal{E}) R_{\nu\lambda}(r) Y_{\lambda}^{\mu}(\hat{r})$$

et la moyenne sur la direction du champ électrique donnent l'expression compacte de la section efficace :

$$\sigma_{if}(k_i) = \frac{32\pi^2}{k_i^2} \int_{|k_i-k_f|}^{k_i+k_f} \frac{K dK}{(K^2 + \lambda_D^2)^2} \times \sum_{L=\lambda-l}^{\lambda+l} \left[\sum_{\nu,\lambda} \sum_{n,l} a_{\nu\lambda}^f(\mathcal{E}) a_{nl}^i(\mathcal{E}) C(lm, \lambda\mu; L \mu-m) I_{\nu\lambda,nl}^L(K) \right]^2 \quad (4.50)$$

où I_L est l'élément de matrice radial :

$$I_{\nu\lambda,nl}^L(K) = \int_0^\infty r^2 dr R_{\nu\lambda}(r) R_{nl}(r) j_L(Kr) \quad (4.51)$$

et j_L la fonction de Bessel sphérique d'ordre L et $C(lm, \lambda\mu; L \mu-m)$ est un coefficient de Clebsch-Gordan.

Il est important de noter que l'approche de Perrot emploie un modèle d'ion monoélectronique sans couplage spin-orbite, mais introduit un écrantage plasma au coeur de l'édifice atomique. **Cet écrantage est spécifique d'une situation donnée en densité et température** et limite par conséquent l'extrapolation des résultats acquis à des cas "extrêmes" (Te=500 eV, Ne=1.09 $10^{24} e/cm^3$ pour $\lambda_D = 3.u.a.$). Néanmoins, cette constante d'écran permet de lever la dégénérescence des niveaux (séparant 2s et 2p de 0.1 Ryd) et de continuer de les nommer avec la notation spectroscopique usuelle (2s et 2p) en présence de champ. Sans écrantage, les niveaux seraient restés dégénérés et le traitement aurait dû se faire à l'aide des états paraboliques.

Son étude se restreint aux excitations $1s \rightarrow 2s$, $1s \rightarrow 2p$ et $2s \rightarrow 2p$ mais fait apparaître la grande sensibilité des sections efficaces au champ électrique, particulièrement dans le cas des excitations entre niveaux proches où la variation peut atteindre plusieurs ordres de grandeur.

4.5.2 Modèle Distorted Waves sans couplage spin-orbite

Sans donner tout le détail des calculs, non nécessaire ici, nous avons développé une formulation compacte de la force de collision adaptée aux hydrogénoïdes, dans

la lignée de celle établie par Pindzola [63] ou Peyrusse [61] déjà présentée dans la section précédente.

Nous reprenons le développement de Perrot 4.49 de l'état ionique perturbé sur la base des états non perturbés :

$$\psi_{(i \text{ ou } f),m}(\mathcal{E}, \mathbf{r}) = \sum_{(\alpha \text{ ou } \beta)n,l} a_{(\alpha \text{ ou } \beta)nl}^{(i \text{ ou } f)Nm}(\mathcal{E}) \psi_{(\alpha \text{ ou } \beta)nml}(\mathbf{r}), \quad (4.52)$$

sans modifier le développement en ondes partielles des fonctions d'onde libres présenté en 4.24, 4.25, 4.27. Nous supposons ici, comme dans le modèle suivant, que les électrons libres sont peu perturbés par la présence du champ électrique. Cette hypothèse est acceptable lorsque leur énergie est élevée et dans la mesure où le microchamp électrique existe dans un volume restreint (caractérisé par les distances inter-ioniques). La trajectoire de l'électron est alors peu modifiée. A plus basse énergie, en particulier à proximité de l'énergie du seuil d'excitation, l'électron libre sortant est beaucoup plus sensible au microchamp et notre traitement est sûrement plus discutable. La prise en compte du champ électrique sur les électrons libres peut être réalisée en résolvant leur Hamiltonien en coordonnées paraboliques, comme Bracher *et al* [14] ou C. Valli [79] l'ont effectué récemment, mais au prix d'une complexité beaucoup plus élevée.

La moyenne de la force de collision sur l'orientation des électrons libres 4.28 conduit à :

$$\Omega_{if} = 2 \sum_{l_0 l_1} \sum_{m_0 m_1} \sum_{m_{s_0} m_{s_1}} \sum_{m_{s_i} m_{s_f}} |D_{if}|^2 \quad (4.53)$$

où D_{if} est l'élément de matrice diélectronique de 4.30 modifié par la présence du champ électrique :

$$D_{if} = \sum_{\alpha\beta} a_{n_\alpha l_\alpha}^{im_i}(\mathcal{E}) a_{n_\beta l_\beta}^{fm_f^*}(\mathcal{E}) \left[\left\langle \alpha 0 \left| \frac{2}{r_{12}} \right| \beta 1 \right\rangle - \left\langle \alpha 0 \left| \frac{2}{r_{12}} \right| 1 \beta \right\rangle \right], \quad (4.54)$$

0 et 1 représentant respectivement les ondes partielles ϕ_i et ϕ_f de 4.33.

Nous retrouvons la forme compacte 4.38 :

$$\Omega_{if} = 8 \sum_{l_0, l_1, k} \frac{1}{2k+1} \left((Q_{i0f1}^{(k)})^2 - Q_{i0f1}^{(k)} P_{i01f}^{(k)} + (P_{i01f}^{(k)})^2 \right) \quad (4.55)$$

mais avec les éléments de matrice intermédiaires 4.39, 4.41 modifiés par le microchamp :

$$Q_{i0f1}^{(k)} = \sum_{\alpha\beta} (-1)^{l_\alpha} a_{n_\alpha l_\alpha}^{im_i}(\mathcal{E}) a_{n_\beta l_\beta}^{fm_f^*}(\mathcal{E}) \begin{pmatrix} l_\alpha & k & l_\beta \\ -m_i & m_i - m_f & m_f \end{pmatrix} Q_{\alpha 0 \beta 1}^{(k)}, \quad (4.56)$$

$$P_{i01f}^{(k)} = \sum_{\alpha\beta} a_{\alpha} a_{\beta} \begin{pmatrix} l_{\alpha} & k & l_{\beta} \\ -m_i & m_i - m_f & m_f \end{pmatrix} (2k+1) \sum_{k'} (-1)^{k+k'} \begin{Bmatrix} l_{\alpha} & l_{\beta} & k \\ l_0 & l_1 & k' \end{Bmatrix} Q_{\alpha01\beta}^{(k')}, \quad (4.57)$$

les éléments restants correspondant à ceux du développement de Pindzola en l'absence de perturbation électrique 4.39, 4.40, 4.42 :

$$\begin{aligned} Q_{\alpha0\beta1}^{(k)} &= R_{\alpha0\beta1} < cl_{\alpha} || C^{(k)} || c'l_{\beta} > < cl_0 || C^{(k)} || c'l_1 > \\ Q_{\alpha01\beta}^{(k)} &= R_{\alpha01\beta} < cl_{\alpha} || C^{(k)} || c'l_1 > < cl_0 || C^{(k)} || c'l_{\beta} > \\ R_{\alpha0\beta1}^{(k)} &= \int \int \frac{2r_{\leq}^k}{r_{>}^{k+1}} P_{\alpha}(r_1) P_0(r_2) P_{\beta}(r_1) P_1(r_2) dr_1 dr_2. \end{aligned} \quad (4.58)$$

4.5.3 Modèle Distorted Waves en couplage LSJ

Nous reprenons, pour la structure atomique, l'ordre de couplage généalogique de R. D. Cowan [19] présenté au début du chapitre 3 sur l'effet Stark (3.1). Les états perturbés sont développés de la même façon qu'en 3.10 et 4.52 :

$$|\gamma M\rangle = \sum_{\alpha} a_{\alpha}(\mathcal{E}) |\gamma_{\alpha} L_{\alpha} S_{\alpha} J_{\alpha} M\rangle \quad (4.59)$$

(dans le cas des hydrogénoïdes, la notation LSJM n'a pas de sens et nous reprenons la notation $|nJ_{\pm}M\rangle$).

En effectuant le même développement qu'au paragraphe précédent, nous trouvons l'expression de la force de collision lorsque les électrons de l'ion $\gamma_i M_i$ et $\gamma_f M_f$ ne sont pas couplés avec l'électron libre $k_i l_i j_i m_i$ et $k_f l_f j_f m_f$ ($j = l \pm 1/2$) :

$$\begin{aligned} \Omega_{if} = & 2 \sum_{\alpha, \beta, \alpha', \beta'} a_{\alpha}^* a_{\beta} a_{\alpha'} a_{\beta'}^* \sum_{l_i, l_f, j_i, j_f, m_i, m_f} \times \\ & \left\langle \gamma_{\alpha} L_{\alpha} S_{\alpha} J_{\alpha} M_i k_i l_i j_i m_i \left| \sum_{i=1}^N \frac{2}{r_{i,N+1}} \right| \gamma_{\beta} L_{\beta} S_{\beta} J_{\beta} M_f k_f l_f j_f m_f \right\rangle \times \\ & \left\langle \gamma_{\beta'} L_{\beta'} S_{\beta'} J_{\beta'} M_f k_f l_f j_f m_f \left| \sum_{i=1}^N \frac{2}{r_{i,N+1}} \right| \gamma_{\alpha'} L_{\alpha'} S_{\alpha'} J_{\alpha'} M_i k_i l_i j_i m_i \right\rangle. \end{aligned} \quad (4.60)$$

Néanmoins, cette présentation compacte de la force de collision masque beaucoup les difficultés de son usage pratique. Les éléments de matrice diélectroniques sont difficilement programmables sous cette forme si l'on désire pouvoir étudier des ions de structure très générale (plusieurs électrons répartis sur plusieurs couches, non-nécessairement complètes). Nous avons choisi d'employer les formules développées par R. D. Cowan [19] pour les éléments de matrice diélectroniques. Nous couplons les électrons libres à la structure ionique de façon à obtenir un couplage du type $[(L_{ion}, l_{libre})L, (S_{ion}, s_{libre})S]JM\rangle$.

Une transformation en couplage $jjJM$ puis $LSJM$ modifie Ω en :

$$\begin{aligned} \Omega_{if} = & 2 \sum_{\alpha, \beta, \alpha', \beta'} a_{\alpha}^* a_{\beta} a_{\alpha'} a_{\beta'}^* \sum_{l_i, l_f, j_i, j_f, m_i, m_f} \times \\ & \sum_{\mathcal{J}_{\alpha} \mathcal{M}_{\alpha}} \sum_{\mathcal{J}_{\beta} \mathcal{M}_{\beta}} \sum_{\mathcal{J}_{\alpha'} \mathcal{M}_{\alpha'}} \sum_{\mathcal{J}_{\beta'} \mathcal{M}_{\beta'}} C(J_{\alpha} j_i M_i m_i, \mathcal{J}_{\alpha} \mathcal{M}_{\alpha}) C(J_{\beta} j_f M_f m_f, \mathcal{J}_{\beta} \mathcal{M}_{\beta}) \times \\ & C(J_{\alpha'} j_i M_i m_i, \mathcal{J}_{\alpha'} \mathcal{M}_{\alpha'}) C(J_{\beta'} j_f M_f m_f, \mathcal{J}_{\beta'} \mathcal{M}_{\beta'}) \times \\ & \left\langle (\gamma_{\alpha} L_{\alpha} S_{\alpha} J_{\alpha}, l_i j_i) \mathcal{J}_{\alpha} \mathcal{M}_{\alpha} \left| \sum_{i=1}^N \frac{2}{r_{i, N+1}} \right| (\gamma_{\beta} L_{\beta} S_{\beta} J_{\beta}, l_f j_f) \mathcal{J}_{\beta} \mathcal{M}_{\beta} \right\rangle \times \\ & \left\langle (\gamma_{\beta'} L_{\beta'} S_{\beta'} J_{\beta'}, l_f j_f) \mathcal{J}_{\beta'} \mathcal{M}_{\beta'} \left| \sum_{i=1}^N \frac{2}{r_{i, N+1}} \right| (\gamma_{\alpha'} L_{\alpha'} S_{\alpha'} J_{\alpha'}, l_i j_i) \mathcal{J}_{\alpha'} \mathcal{M}_{\alpha'} \right\rangle \end{aligned} \quad (4.61)$$

puis

$$\begin{aligned} \Omega_{if} = & 2 \sum_{\alpha, \beta, \alpha', \beta'} a_{\alpha}^* a_{\beta} a_{\alpha'} a_{\beta'}^* \sum_{l_i, l_f, j_i, j_f, m_i, m_f} \times \\ & \sum_{\mathcal{J}_{\alpha} \mathcal{M}_{\alpha}} \sum_{\mathcal{J}_{\beta} \mathcal{M}_{\beta}} \sum_{\mathcal{J}_{\alpha'} \mathcal{M}_{\alpha'}} \sum_{\mathcal{J}_{\beta'} \mathcal{M}_{\beta'}} C_{\alpha} C_{\beta} C_{\alpha'} C_{\beta'} \times \\ & \sum_{\mathcal{L}_{\alpha} S_{\alpha}} \sum_{\mathcal{L}_{\beta} S_{\beta}} \sum_{\mathcal{L}_{\alpha'} S_{\alpha'}} \sum_{\mathcal{L}_{\beta'} S_{\beta'}} T_{\mathcal{L}_{\alpha} S_{\alpha}, J_{\alpha} j_i} T_{\mathcal{L}_{\beta} S_{\beta}, J_{\beta} j_f} T_{\mathcal{L}_{\alpha'} S_{\alpha'}, J_{\alpha'} j_i} T_{\mathcal{L}_{\beta'} S_{\beta'}, J_{\beta'} j_f} \times \\ & \left\langle \mathcal{L}_{\alpha} S_{\alpha} \mathcal{J}_{\alpha} \mathcal{M}_{\alpha} \left| \sum_{i=1}^N \frac{2}{r_{i, N+1}} \right| \mathcal{L}_{\beta} S_{\beta} \mathcal{J}_{\beta} \mathcal{M}_{\beta} \right\rangle \times \\ & \left\langle \mathcal{L}_{\beta'} S_{\beta'} \mathcal{J}_{\beta'} \mathcal{M}_{\beta'} \left| \sum_{i=1}^N \frac{2}{r_{i, N+1}} \right| \mathcal{L}_{\alpha'} S_{\alpha'} \mathcal{J}_{\alpha'} \mathcal{M}_{\alpha'} \right\rangle, \end{aligned} \quad (4.62)$$

où $T_{\mathcal{L}S, Jj}$ est l'opérateur de modification du couplage :

$$T_{\mathcal{L}S, Jj} = [\mathcal{L}, S, J, j]^{1/2} \begin{Bmatrix} L & l & \mathcal{L} \\ S & s & \mathcal{S} \\ J & j & \mathcal{J} \end{Bmatrix} \quad (4.63)$$

Enfin, comme l'interaction coulombienne conserve $\mathcal{L}S\mathcal{J}\mathcal{M}$ et est indépendante de $\mathcal{J}\mathcal{M}$ (car c'est une force interne à l'édifice ionique) :

$$\begin{aligned} \Omega_{if} = & 2 \sum_{\alpha, \beta, \alpha', \beta'} a_{\alpha}^* a_{\beta} a_{\alpha'} a_{\beta'}^* \sum_{l_i, l_f, \mathcal{L}, S, \mathcal{L}', S'} \times \\ & \left\langle \gamma_{\alpha} (L_{\alpha}, l_i) \mathcal{L}, (S_{\alpha}, s) \mathcal{S} \left\| \sum_{i=1}^N \frac{2}{r_{i, N+1}} \right\| \gamma_{\beta} (L_{\beta}, l_f) \mathcal{L}, (S_{\beta}, s) \mathcal{S} \right\rangle \times \\ & \left\langle \gamma_{\beta'} (L_{\beta'}, l_f) \mathcal{L}', (S_{\beta'}, s) \mathcal{S}' \left\| \sum_{i=1}^N \frac{2}{r_{i, N+1}} \right\| \gamma_{\alpha'} (L_{\alpha'}, l_i) \mathcal{L}', (S_{\alpha'}, s) \mathcal{S}' \right\rangle \times \\ & \sum_{\mathcal{J}, \mathcal{J}', j_i, j_f} T_{\mathcal{L}S, J_{\alpha} j_i} T_{\mathcal{L}S, J_{\beta} j_f} T_{\mathcal{L}' S', J_{\alpha'} j_i} T_{\mathcal{L}' S', J_{\beta'} j_f} \sum_{\mathcal{M}, \mathcal{M}', m_i, m_f} C_{\alpha} C_{\alpha'} C_{\beta} C_{\beta'}. \end{aligned} \quad (4.64)$$

La dernière somme peut en être extraite et simplifiée à l'aide de Yutsis [83] (p.152, A. 7.5) :

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\mathcal{M}, \mathcal{M}', m_i, m_f} C(J_\alpha j_i M_i m_i, \mathcal{J} \mathcal{M}) C(J_{\alpha'} j_i M_i m_i, \mathcal{J}' \mathcal{M}') \times \\
 & C(J_\beta j_f M_f m_f, \mathcal{J} \mathcal{M}) C(J_{\beta'} j_f M_f m_f, \mathcal{J}' \mathcal{M}') = \\
 & [\mathcal{J}, \mathcal{J}'] (-1)^{2\mathcal{J}+3(j_i+j_f)+M_i+M_f} \\
 & \sum_a [a] \begin{Bmatrix} \mathcal{J}' & \mathcal{J} & a \\ J_\beta & J_{\beta'} & j_f \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathcal{J}' & \mathcal{J} & a \\ J_\alpha & J_{\alpha'} & j_i \end{Bmatrix} \times \\
 & \begin{pmatrix} J_\alpha & J_{\alpha'} & a \\ M_i & -M_i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_\beta & J_{\beta'} & a \\ M_f & -M_f & 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{4.65}$$

De cette façon :

$$\begin{aligned}
 \Omega_{if} = & 2(-1)^{M_i+M_f} \\
 & \times \sum_{\alpha, \beta, \alpha', \beta'} a_\alpha^* a_\beta a_{\alpha'} a_{\beta'}^* \sum_a [a] \begin{pmatrix} J_\alpha & J_{\alpha'} & a \\ M_i & -M_i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_\beta & J_{\beta'} & a \\ M_f & -M_f & 0 \end{pmatrix} \\
 & \times \sum_{l_i, l_f, \mathcal{L}, \mathcal{L}', \mathcal{S}, \mathcal{S}'} \left\langle \gamma_\alpha(L_\alpha, l_i) \mathcal{L}, (S_\alpha, s) \mathcal{S} \left\| \sum_{i=1}^N \frac{2}{r_{i,N+1}} \right\| \gamma_\beta(L_\beta, l_f) \mathcal{L}, (S_\beta, s) \mathcal{S} \right\rangle \\
 & \left\langle \gamma_{\beta'}(L_{\beta'}, l_f) \mathcal{L}', (S_{\beta'}, s) \mathcal{S}' \left\| \sum_{i=1}^N \frac{2}{r_{i,N+1}} \right\| \gamma_{\alpha'}(L_{\alpha'}, l_i) \mathcal{L}', (S_{\alpha'}, s) \mathcal{S}' \right\rangle \\
 & \times \sum_{\mathcal{J}, \mathcal{J}', j_i, j_f} (-1)^{2\mathcal{J}+j_i+j_f} [\mathcal{J}, \mathcal{J}'] T_{\mathcal{L} \mathcal{S}, J_\alpha j_i} T_{\mathcal{L} \mathcal{S}, J_\beta j_f} T_{\mathcal{L}' \mathcal{S}', J_{\alpha'} j_i} T_{\mathcal{L}' \mathcal{S}', J_{\beta'} j_f} \\
 & \begin{Bmatrix} \mathcal{J}' & \mathcal{J} & a \\ J_\beta & J_{\beta'} & j_f \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathcal{J}' & \mathcal{J} & a \\ J_\alpha & J_{\alpha'} & j_i \end{Bmatrix}.
 \end{aligned} \tag{4.66}$$

Les éléments de matrice diélectroniques sont détaillés dans l'appendice D Ils correspondent à ceux calculés par Cowan pour des structures atomiques multiconfigurationnelles, adaptés pour le cas particulier des excitations collisionnelles.

4.5.4 Convergence des forces de collision partielles aux grands moments angulaires

Les sommes apparaissant dans la force de collision totale (4.66) s'entendent pour la totalité des électrons libres possibles et nécessiteraient, en toute rigueur, d'être menées sur tout l'ensemble des entiers pour $l_i, l_f, \mathcal{L}, \mathcal{L}', \mathcal{J}, \mathcal{J}', j_i$ et j_f , en notant néanmoins que ces nombres quantiques sont contraints les uns par les autres par le biais des $3j$ et $6j$. En pratique, seul un calcul analytique permet de mener la

sommation à son terme, ceci n'étant possible que pour l'approximation de Born sans échange. Dans les autres cas, une approche numérique s'impose et, même si les moyens informatiques, en évolution constante, ont considérablement repoussé les limites calculatoires, une troncature précoce est inéluctable dans les sommes.

A titre d'exemple, en limitant le nombre quantique orbital des électrons libres à 60 - ce qui contraint la valeur des autres nombres quantiques précités -, le calcul de la force de collision d'une excitation $1s2s \rightarrow 1s2p$ de l'aluminium héliumöide, pour un champ électrique 1 u.a. et une énergie du libre initial de l'ordre de 100 Ryd, prend actuellement plusieurs dizaines de secondes pour chaque transition $\alpha JM \rightarrow \alpha' J' M'$ sur un ordinateur rapide et n'atteint pas la convergence malgré la troncature tardive... (On notera que la formule complète de Ω en présence de champ contient 15 sommes imbriquées, sans compter le calcul de chaque élément de matrice, ensemble qui finit par occuper une place mémoire démesurée.)

Dans de nombreuses situations, les sommes partielles convergent à grande vitesse et le reste s'amenuise de plusieurs ordres de grandeur à chaque nouvelle itération. Ceci est particulièrement vrai pour les transitions interdites entre des niveaux très différents (deux couches distinctes bien éloignées), ex : $1s \rightarrow 2s$, $1s \rightarrow 3d$... où une dizaine d'ondes partielles sont largement suffisantes. La situation se complique dans le cas des transitions permises, des transitions entre niveaux proches et encore à énergie incidente croissante. De nombreux calculs effectuent une troncature pure et simple et mentionnent que ceci a pour effet de réduire plus ou moins notablement la valeur de la section efficace par rapport à sa valeur exacte [3, 51]. Certains auteurs ont néanmoins remarqué la forme très lissée des forces de collision partielles, quelle que soit la transition, pourvu que l'indice de sommation soit convenablement choisi. C'est en général le moment angulaire total (\mathcal{L} ou \mathcal{J} suivant le couplage choisi). Les forces de collision partielles se comportent comme une simple suite géométrique décroissante, dont il suffit de trouver le rapport pour en extrapoler la somme totale.

La formulation choisie ici pour les forces de collision ne permet pas de choisir les moments angulaires totaux comme indices de sommation de manière aisée (dans la mesure où ils sont contraints par tous les moments angulaires précédents et sont au nombre de 2 : \mathcal{L}_i et \mathcal{L}_f ou \mathcal{J}_i et \mathcal{J}_f). La solution la plus pratique consistait à choisir le moment angulaire orbital maximal des électrons libres pour conserver la forme générale de l'équation et limiter ainsi le temps de calcul.

$$\Omega_{totale} = \sum_{l_{max}=0}^{\infty} \Omega_{l_{max}} \quad (4.67)$$

où

$$\Omega_{l_{max}} = \sum_{l_i=0}^{l_{max}-1} \Omega_{l_i, l_f=l_{max}} + \sum_{l_f=0}^{l_{max}-1} \Omega_{l_f, l_i=l_{max}} + \Omega_{l_f=l_i=l_{max}} \quad (4.68)$$

Il reste à chercher le coefficient de décroissance de $\Omega_{l_{max}}$:

$$\Omega_{l_{max}+1} \approx \alpha \Omega_{l_{max}}. \quad (4.69)$$

Dans les faits, ceci est bien valable pour les sommes partielles sur \mathcal{L} ou \mathcal{J} mais un peu moins pour les sommes partielles sur l_{max} . Néanmoins, les fluctuations du rapport α ne l'empêchent pas de conserver "globalement" une allure assez stable. On a donc choisi de moyenner ce coefficient sur plusieurs Ω partielles :

$$\alpha_{l_{max}} = \frac{\Omega_{l_{max}} + \Omega_{l_{max}-1} + \Omega_{l_{max}-2} + \Omega_{l_{max}-3}}{\Omega_{l_{max}-1} + \Omega_{l_{max}-2} + \Omega_{l_{max}-3} + \Omega_{l_{max}-4}} \quad (4.70)$$

(il faut remarquer que dans le cas d'une suite géométrique parfaite, la définition de α est bien conservée). $\alpha_{l_{max}-1}$ et $\alpha_{l_{max}-2}$ sont définis de la même façon en décalant les indices, finalement :

$$\alpha = \frac{\alpha_{l_{max}} + \alpha_{l_{max}-1} + \alpha_{l_{max}-2}}{3} \quad (4.71)$$

Il est alors manifeste que la moyenne a été réalisée sur les forces de collision partielles entre $\Omega_{l_{max}}$ et $\Omega_{l_{max}-6}$ tout en essayant de conserver une certaine pertinence aux coefficients intermédiaires, en tâchant de les stabiliser par une moyenne sur 4 sommes partielles.

La somme totale s'écrit :

$$\Omega = \sum_{l_{max}=0}^{l_{tronc}} \Omega_{l_{max}} + \sum_{l_{max}=l_{tronc}+1}^{\infty} \Omega_{l_{max}} = \sum_{l=0}^{l_{tronc}} \Omega_l + \sum_{l=l_{tronc}+1}^{\infty} \overline{\Omega_{l_{tronc}}} \alpha^{l-l_{tronc}} \quad (4.72)$$

soit :

$$\Omega = \sum_{l=0}^{l_{tronc}} \Omega_l + \overline{\Omega_{l_{tronc}}} \cdot \frac{\alpha}{1-\alpha}.$$

(4.73)

où l_{tronc} est la valeur maximum de l à la troncature et $\overline{\Omega_{l_{tronc}}}$ est une valeur lissée de la force de collision partielle à la coupure :

$$\sum_{i=0}^6 \overline{\Omega_{l_{tronc}}} \cdot \alpha^{-i} = \sum_{i=0}^6 \Omega_{l_{tronc}-i}. \quad (4.74)$$

Nous présentons dans les figures suivantes divers cas où il faut faire appel à une extrapolation qui démontrent que celle ci est pertinente, même dans les cas

requerrant une grande robustesse (transitions autorisées, à haute énergie incidente, entre des états très proches en énergies).

La convergence des forces de collision partielles est directement liée à la portée des éléments de matrice d'interaction. Hatton [38] détaille les cas des transitions permises (portée en $1/r^2$) et interdites (portée en e^{-r} pour $1s \rightarrow 2s$) dans le cas des transitions hydrogénoïdes impliquant les couches $n=1$ et $n=2$. La convergence est d'autant plus lente que la portée est longue. Cette remarque peut être réemployée dans le cadre des transitions en présence de champ électrique. L'effet Stark mélange les différents états et mène la plupart des éléments de matrice d'interaction vers des longues portées, l'interaction la plus forte entraînant la forme générale de l'élément de matrice. La figure 4.2 correspond à la situation opposée où une transition permise $1s2s\ ^3S_1 M=0 \rightarrow 1s2p\ ^3P_2 M=0$ dans Al XII à champ nul devient interdite pour des champs compris entre 0.3 et 0.5 u.a. car 3P_2 effectue un évitement de niveau avec 1S_0 qui se traduit par un échange de fonctions d'onde (voir figure 3.2 dans le chapitre sur l'effet Stark). Un nouvel évitement avec 3P_1 et 3P_0 vers 0.6 u.a. rend à nouveau la transition permise mais moins favorable. Néanmoins, dans de nombreux cas, l'allongement de la portée des interactions, du fait du mélange des fonctions d'onde, n'est pas suffisant pour empêcher la convergence rapide des forces de collision, en particulier pour les transitions entre deux couches distinctes (figure 4.3, $1s\ M=0.5 \rightarrow 3d^2 D_{2.5} M=1.5$ dans Al XIII). Dans ce cas, l'allongement se traduit par une modification générale de l'amplitude des forces de collision partielles, sans en changer le coefficient de décroissance α .

Dans le cas des électrons libres de forte énergie, les ondes partielles d'ordre élevé qui ne peuvent sonder que des régions de $r \geq l/k$, se rapprochent du coeur et participent de plus en plus à la transition (figure 4.1). Néanmoins, les sommes partielles Ω_l d'ordre élevé convergent vers une limite à grande énergie.

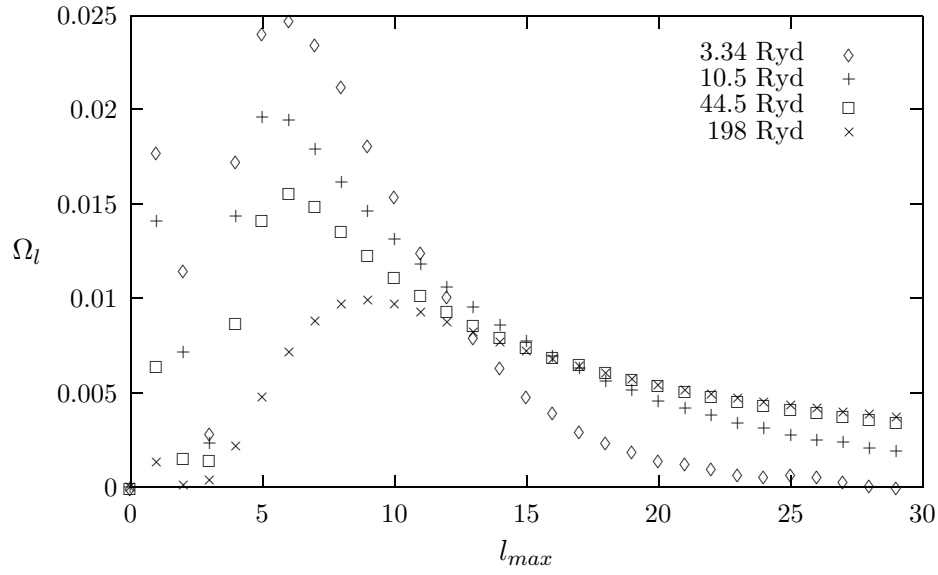


FIG. 4.1 – Forces de collision partielles $\Omega_{l_{max}}$ (Formule 4.68) pour la transition $1s2s\ ^3S_1\ M=0 \rightarrow 1s2p\ ^3P_2\ M=0$ de Al XII pour **plusieurs énergies incidentes** : 3.34 Ryd (losanges), 10.5 Ryd (+), 44.5 Ryd (carrés) et 198 Ryd (×) et à champ électrique nul.

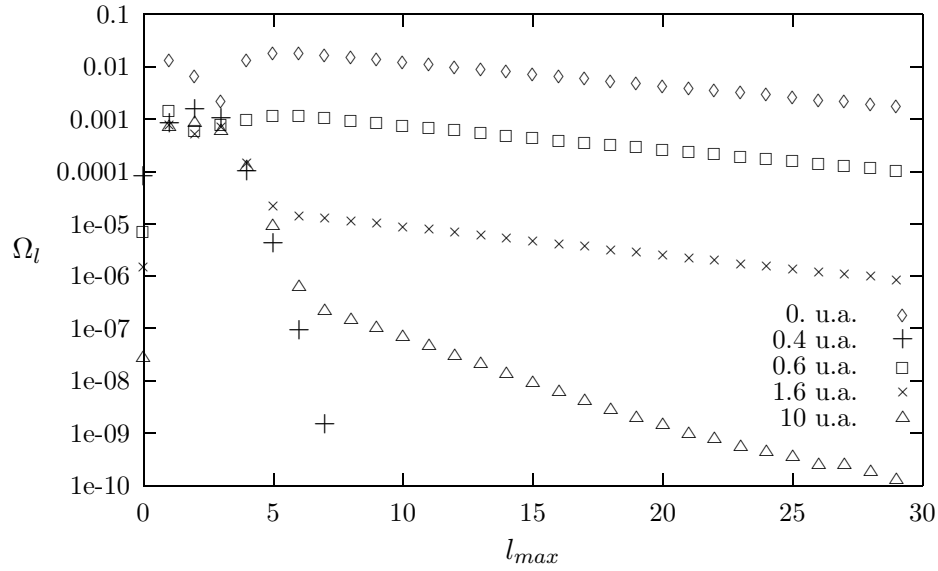


FIG. 4.2 – Forces de collision partielles $\Omega_{l_{max}}$ (Formule 4.68), en échelle logarithmique, pour la transition entre les états $1s2s\ ^3S_1\ M=0$ et $1s2p\ ^3P_2\ M=0$ de Al XII, perturbés par le champ électrique pour une énergie incidente de l'ordre de 96 Ryd et **5 valeurs du champ électrique** : champ nul (losanges), 0.4 u.a. (+), 0.6 u.a. (carrés), 1.6 u.a. (×) et 10 u.a. (triangles).

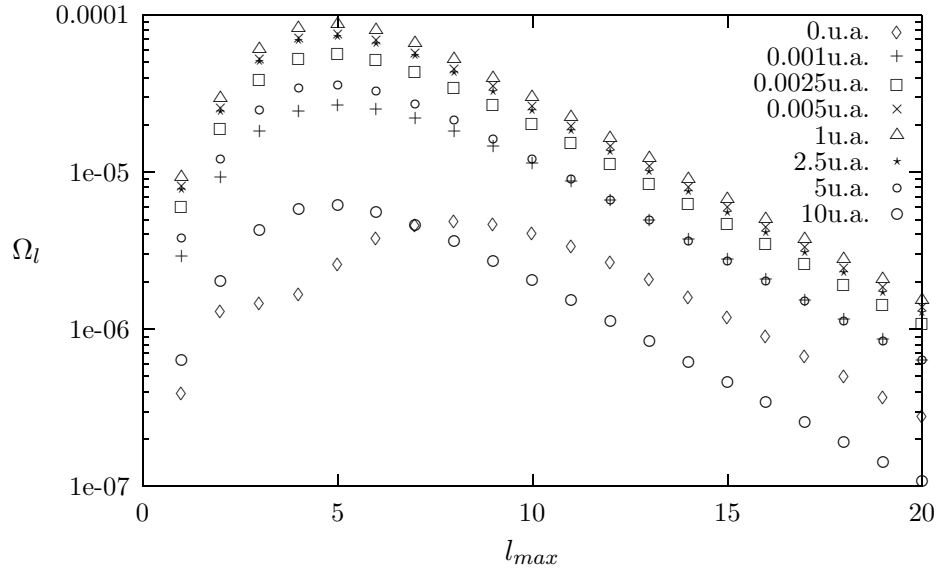


FIG. 4.3 – Forces de collision partielles (Formule 4.68), en échelle logarithmique, pour la transition $1s\ ^3S_{1.5}\ M=0.5 \rightarrow 3d\ ^2D_{2.5}\ M=1.5$ de Al XIII pour une énergie incidente de l'ordre de 608 Ryd et **8 valeurs du champ électrique** : champ nul (losanges), 0.001 u.a. (+), 0.0025 u.a. (carrés), 0.005 u.a. (×), 1 u.a. (triangles), 2.5 u.a. (★), 5 u.a. (petit o) et 10 u.a. (grand o).

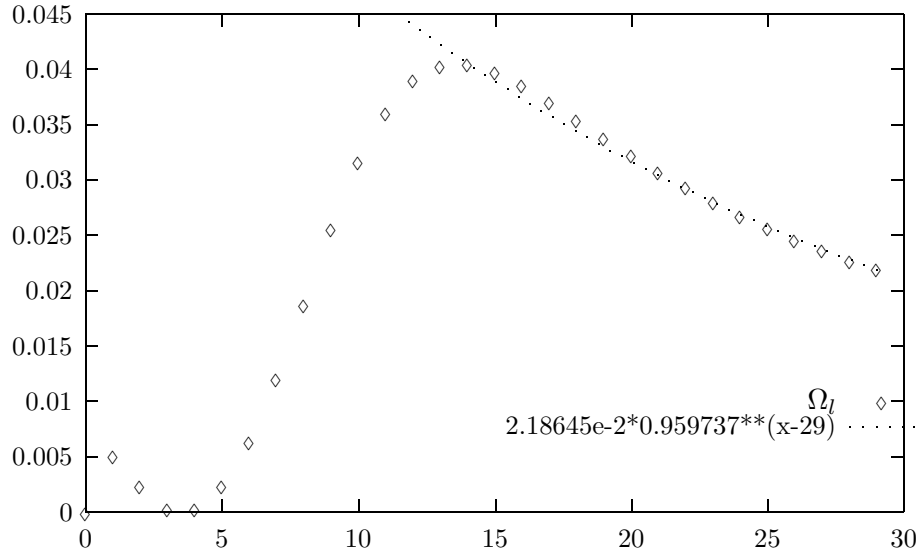


FIG. 4.4 – Forces de collision partielles (Formule 4.68) pour la transition $1s3s\ ^3S_1\ M=0 \rightarrow 1s3p\ ^3P_2\ M=0$ de Al XII à une énergie incidente de 95 Ryd et à champ électrique nul (losanges). En pointillé est représentée la fonction (du type $a * b^l$) employée pour ajuster les forces de collisions partielles à grand moment angulaire à l'aide des formules de convergence.

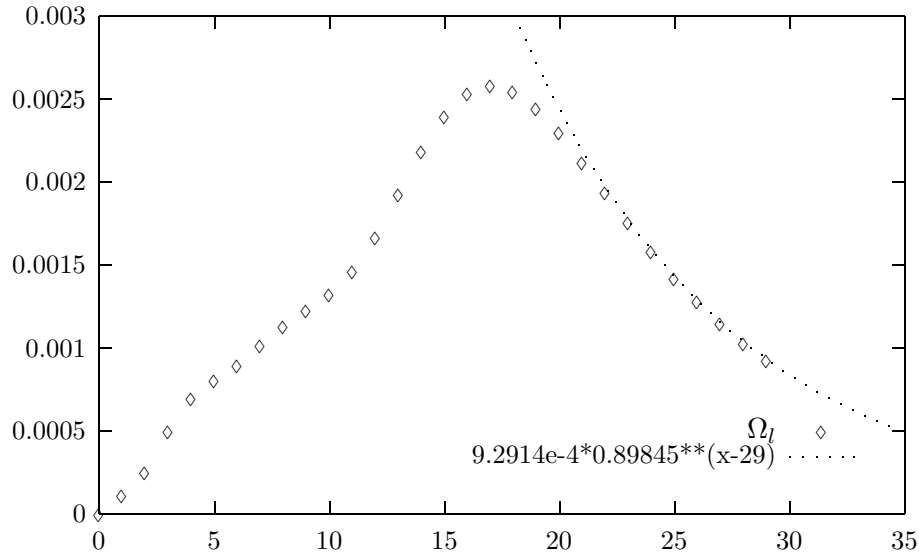


FIG. 4.5 – Forces de collision partielles (Formule 4.68) pour la transition $1s3s\ ^3S_1\ M=0 \rightarrow 1s4d\ ^3D_3\ M=3$ de Al XII à une énergie incidente de 102 Ryd et à champ électrique nul. Même légende qu'à la figure précédente.

4.5.5 Comparaison de ces modèles avec du Néon hydrogéoïde

Etant donné le très petit nombre d'études connues sur notre sujet, nous avons essayé les deux approches présentées précédemment en les comparant entre elles et avec les résultats de Perrot (figures 4.6 et 4.7), seuls présents dans ce domaine. Notre choix s'est donc porté sur le Néon hydrogéoïde, déjà choisi par cet auteur, et sur les transitions impliquant les couches $n=1$ et $n=2$.

La question de l'écrantage des interactions, qu'elles soient internes à l'atome ou entre l'électron libre et l'atome, reste discutée, comme nous l'avons précisé dans le premier chapitre de ce mémoire. Les énergies de liaison des électrons liés étudiés ici ($n=1$ ou 2) sont en général égales ou largement supérieures à la température du plasma, c'est aussi fréquemment les cas de celles des électrons libres impliqués dans des transitions de couche K. Les autres électrons libres du plasma sont alors trop lents pour créer un nuage électronique autour de ces particules rapides. Dans notre approche purement perturbative, notre choix s'est donc porté vers un potentiel atomique non écranté, à l'inverse de celui de F. Perrot. Les fonctions d'onde atomiques, comme dans le reste de cet ouvrage, proviennent d'un programme Hartree-Fock non-relativiste de Perrot. Les énergies des états relativistes sont celles issues de l'équation 3.10 ou la moyenne de $^2P_{3/2}$ et $^2P_{1/2}$ s'il n'y a pas de couplage spin-orbite.

Sans interaction l.s., les résultats du modèle DW (paragraphe 4.5.2) présentent le même comportement que ceux de Perrot. A mesure qu'augmente le

| | Perrot, avec potentiel atomique écrané | sans potentiel écrané, sans couplage spin-orbite | | sans potentiel écrané, avec couplage spin-orbite |
|----|----------------------------------------------|--------------------------------------------------------|-------------|--------------------------------------------------------|
| 2s | -18.99 | -25.0416 | $^2S_{1/2}$ | -25.0416 |
| 2p | -18.89 | -25.0194 | $^2P_{1/2}$ | -25.0416 |
| | | | $^2P_{1.5}$ | -25.0083 |

TAB. 4.1 – Energies des états n=2 de Ne X (Ryd)

champ, la force de collision Ω_{1s2s} croît, $\Omega_{1s2p\ m=0}$ décroît et elles tendent à se confondre au delà d'un champ $\mathcal{E} = 0.3u.a.$ (figure 4.8). On montre aisément que cela correspond à une rotation dans l'espace des états n=2 - m=0, les fonctions d'onde sous fort champ étant composées à parité des fonctions d'onde sans champ :

$$\lim_{\mathcal{E} \rightarrow \infty} |\pm \rangle = \frac{|2s \rangle \pm |2p\ m=0 \rangle}{\sqrt{2}} \quad (4.75)$$

l'énergie de ces états s'écrit :

$$E_{\pm} = \frac{E_{2s} + E_{2p}}{2} \pm \frac{E_{2s} - E_{2p}}{2} \sqrt{1 + X^2} \quad (4.76)$$

où $X = \frac{2\gamma\mathcal{E}}{E_{2p} - E_{2s}}$ est le rapport des énergies de la perturbation induite par le champ sur la différence des niveaux. γ est l'élément de matrice Stark : $\gamma = \frac{2}{\sqrt{3}} \int_0^\infty r P_{2s} P_{2p} dr$, $|+ \rangle$ correspond à l'état d'énergie la plus élevée (celui issu de $|2p\ m=0 \rangle$) et $|- \rangle$ à celui d'énergie la plus basse (issu de $|2s \rangle$).

La force de collision d'une excitation à partir du fondamental adopte la forme simple :

$$\Omega_{1s|\pm \rangle} = \frac{1}{1 + \left(\frac{1 \pm \sqrt{1+X^2}}{X}\right)^2} \Omega_{1s2s} + \frac{1}{1 + \left(\frac{X}{1 \pm \sqrt{1+X^2}}\right)^2} \Omega_{1s2p_0}, \quad (4.77)$$

et les deux coefficients convergent bien vers 1/2 pour un champ infini.

On note aussi une diminution très conséquente de la force de collision pour les transitions à l'intérieur de la couche n=2, d'autant plus marquée que les états possèdent la même valeur de m , projection du moment orbital l sur l'axe Oz (figure 4.9, bien noter l'échelle logarithmique). Cette décroissance très importante marque le passage d'une transition permise (2s vers 2p, $\Delta l = 1$) vers une transition partiellement autorisée dans le cas 2s vers 2p m=1 (où il ne reste que 50% de 2s dans l'état issu de 2s à fort champ : diminution de 50% de la force de collision) ou vers une transition interdite pour 2s \rightarrow 2p m=0 (force de collision réduite de 15 à 40 fois).

Il faut néanmoins mentionner un fort décalage entre nos calculs et ceux de Perrot, qui présentent une modification des forces de collision à beaucoup plus fort champ (d'un rapport 3 environ). La formule 4.77 montre, pour le cas particulier $1s \rightarrow 2l$, que la modification de Ω en fonction de \mathcal{E} est inversement proportionnelle à l'intervalle d'énergie séparant les niveaux (les deux coefficients valent respectivement $1/4$ et $3/4$ pour $X = \sqrt{3}$). Ceux de Perrot, écrantés, sont séparés de 0.1 Ryd ; sans écrantage, l'écart se réduit à 0.0222 Ryd, soit un rapport de 4, ce qui correspond approximativement au décalage (3) déjà mentionné avec les résultats écrantés de Perrot.

Sachant que la distribution de microchamp est centrée autour d'une valeur proportionnelle à $N_e^{2/3}$ (à relativement faible densité, on peut utiliser l'approximation de Holtsmark du champ le plus probable), nous pouvons en conclure que nos taux collisionnels seront modifiés pour des densités électroniques 5 à 8 fois plus faibles que celles de Perrot. Il apparaît donc manifeste que le choix des énergies des niveaux de départ influencera notablement les résultats ultérieurs. Une étude précise passe donc par une modélisation très fine de la structure atomique.

Dans le cadre du **modèle Distorted Waves avec interaction $1s$** (paragraphe 4.5.3), les états en l'absence de champ de moment angulaire total $J=1/2$ sont fort différents de ceux sans interaction $1s$ (tableau 4.2). Par conséquent, les forces de collisions en l'absence de champ sont distinctes de celles des états sans couplage $l.s$, même si ceci ne reflète qu'un changement de notation et non une modification physique.

| | $J = 1/2-$ | $J = 1/2+$ | $^2P_{3/2}$ |
|-------------|---------------|--------------|-------------|
| $^2S_{1/2}$ | $1/\sqrt{2}$ | $1/\sqrt{2}$ | 0 |
| $^2P_{1/2}$ | $-1/\sqrt{2}$ | $1/\sqrt{2}$ | 0 |
| $^2P_{3/2}$ | 0 | 0 | 1 |

TAB. 4.2 – Coefficients des sous-niveaux $n=2$, $M_J = 1/2$, de Ne X pour un champ électrique infinitésimal (coefficients de mélange des fonctions d'onde).

| | $J = 1/2-$ | $J = 1/2+$ | $^2P_{3/2}$ |
|-------------|-------------|-------------|-------------|
| $^2S_{1/2}$ | ~ 0.7 | ~ 0 | ~ 0.7 |
| $^2P_{1/2}$ | ~ -0.4 | ~ 0.8 | ~ 0.4 |
| $^2P_{3/2}$ | ~ -0.6 | ~ -0.6 | ~ 0.6 |

TAB. 4.3 – Rotation des sous-niveaux $n=2$, $M_J = 1/2$, de Ne X pour un champ électrique ≥ 0.3 u.a. : coefficients de mélange des fonctions d'onde.

Dans ces conditions ($M = \pm 1/2$), la transition $1s - n=2$, $J = 1/2-$ varie au

plus de 12% jusqu'à 0.04 u.a. puis revient vers sa valeur non perturbée à champ électrique élevé car l'état $J = 1/2-$ n'effectue qu'une rotation dans les états issus de 2p (tableau 4.3). La transition $1s - J = 1/2+$, équivalente à la précédente à champ nul, subit une forte croissance vers la valeur de la transition autorisée $1s - 2p$. À l'inverse, la transition $1s - J = 3/2$, équivalente à $1s - 2p$ à champ nul, décroît vers la même valeur que $1s - J = 1/2$ non perturbé, cette modification s'opérant pour des champs 1.5 fois plus élevés que pour les états non couplés (la différence d'énergie valant dans le cas couplé 0.0333 Ryd au lieu de 0.0222 Ryd sans couplage).

Le comportement des forces de collision intra-couche s'explique de façon similaire : les transitions $J = 1/2- - J = 3/2 \ |M| = 1/2$, $J = 1/2+ - J = 3/2 \ |M| = 3/2$ décroissent très fortement vers des transitions interdites, tandis que $J = 1/2- - J = 3/2 \ |M| = 3/2$ et $J = 1/2+ - J = 3/2 \ |M| = 1/2$ varient peu et temporairement de la même façon que $1s - J = 1/2-$. Inversement, la transition $J = 1/2- - J = 1/2+$ initialement interdite et peu favorable croît largement vers la valeur des transitions non perturbées $J = 1/2 - J = 3/2$. Nous n'avons pas présenté de transitions entre $J = 3/2 \ |M| = 3/2$ et $J = 3/2 \ |M| = 1/2$ dont les forces de collision sont problématiques à calculer en l'absence de champ, mais il semble logique d'attendre des valeurs semblables à celles de $J = 1/2- - J = 1/2+$ à fort champ en raison de la similitude des fonctions d'onde pour des champs supérieurs à 0.3 u.a.

En conclusion, nos résultats présentent les mêmes tendances générales que ceux de Perrot, mais avec des variations beaucoup plus précoces en fonction du champ. Une étude en couplage l.s offre, outre une plus grande richesse spectroscopique, quelques modifications importantes dans les transitions intra-couche. En effet, sans couplage, la raie $1s - n=2$ présentera assez peu de modifications dans les ailes du fait des transitions intra-couches très atténuées. En revanche, en présence de couplage spin orbite, les états d'énergies les plus extrêmes ($J = 1/2-$ et $J = 3/2 \ |M| = 1/2$) conservent ou atteignent des taux de transition élevés avec les états peu modifiés en énergie ($J = 1/2+$ et $J = 3/2 \ |M| = 3/2$) qui correspondent au centre de la raie. Comme ces états peu modifiés sont surreprésentés en raison des transitions à partir du fondamental qui leur sont plus favorables, on peut attendre un affaiblissement du centre de raie en faveur des ailes du fait de la redistribution opérée par les transitions plus nombreuses vers les états largement modifiés en énergie. Pour ces deux raisons, nous avons choisi d'effectuer nos calculs avec un couplage spin-orbite.

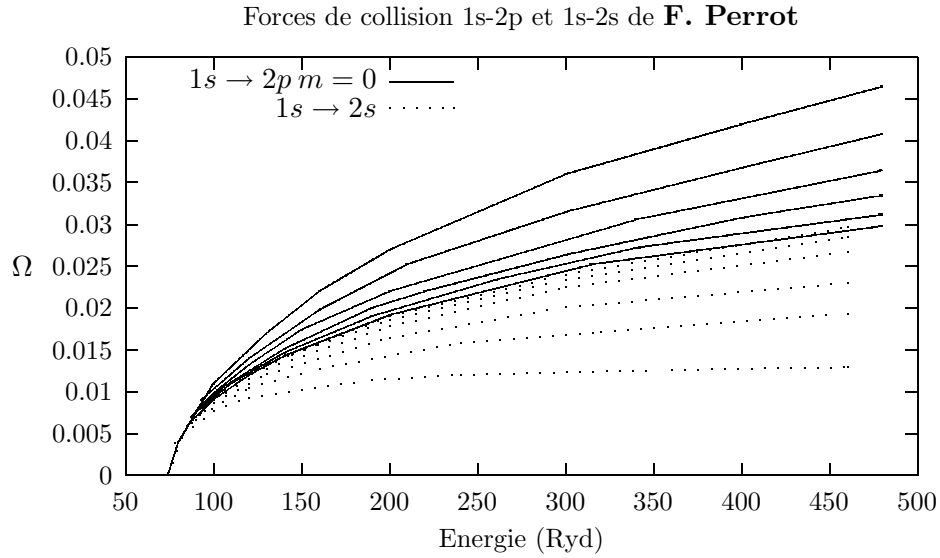


FIG. 4.6 – Forces de collision pour les différentes transitions entre les couches $n=1$ et $n=2$ ($m=0$), **sans couplage l.s.**, en fonction de l'énergie, reprises de **Perrot** [58]. Les différentes courbes correspondent à différentes valeurs du champ électrique : 0, 0.0625, 0.125, 0.25, 0.5 et 1 u.a. L'amplitude générale des courbes $1s \rightarrow 2p$ (en trait plein) décroît à mesure que le champ augmente et elles convergent vers celles de $1s \rightarrow 2s$ (en pointillé) dont l'amplitude s'accroît avec le champ.

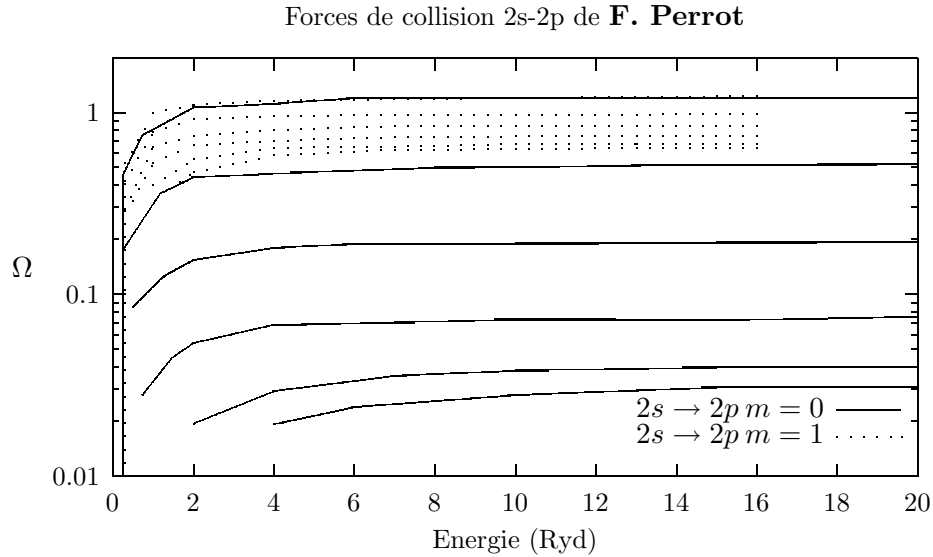


FIG. 4.7 – Même légende pour des transitions intra-couche $n=2$ (**Perrot** [58]). Les amplitudes des courbes de $2s \rightarrow 2p m=0$ (en trait plein) et $2s \rightarrow 2p m=1$ (en pointillé) décroissent quand le champ électrique augmente. A champ nul, les courbes des deux transitions se superposent.

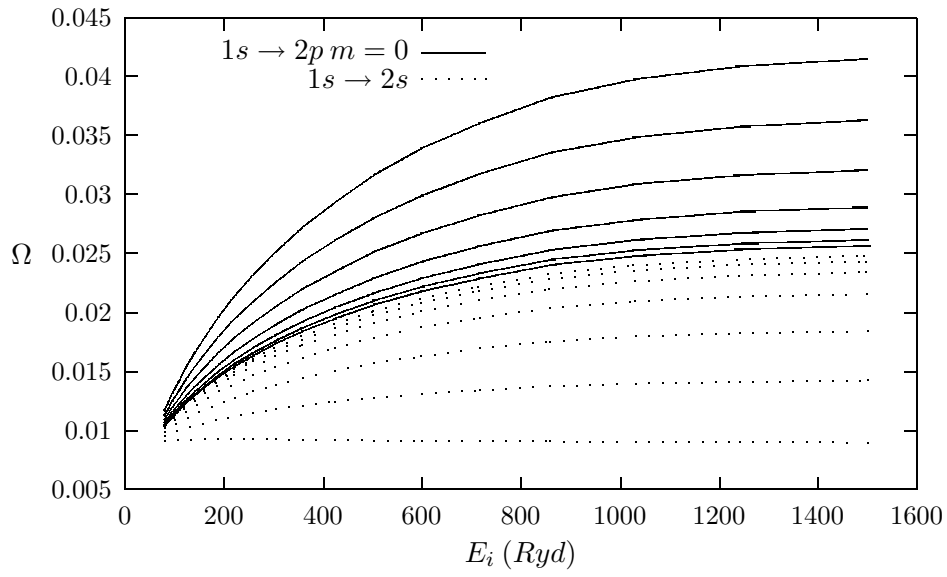


FIG. 4.8 – Forces de collision pour les différentes transitions entre les couches $n=1$ et $n=2$ ($m=0$), **sans couplage l.s.**, en fonction de l'énergie. Les différentes courbes correspondent à différentes valeurs du champ électrique : 0, 0.02, 0.04, 0.08, 0.16, 0.32 et 0.64 u.a. L'amplitude générale des courbes $1s \rightarrow 2p$ (en trait plein) décroît à mesure que le champ augmente et elles convergent vers celles de $1s \rightarrow 2s$ (en pointillé) dont l'amplitude s'accroît avec le champ.

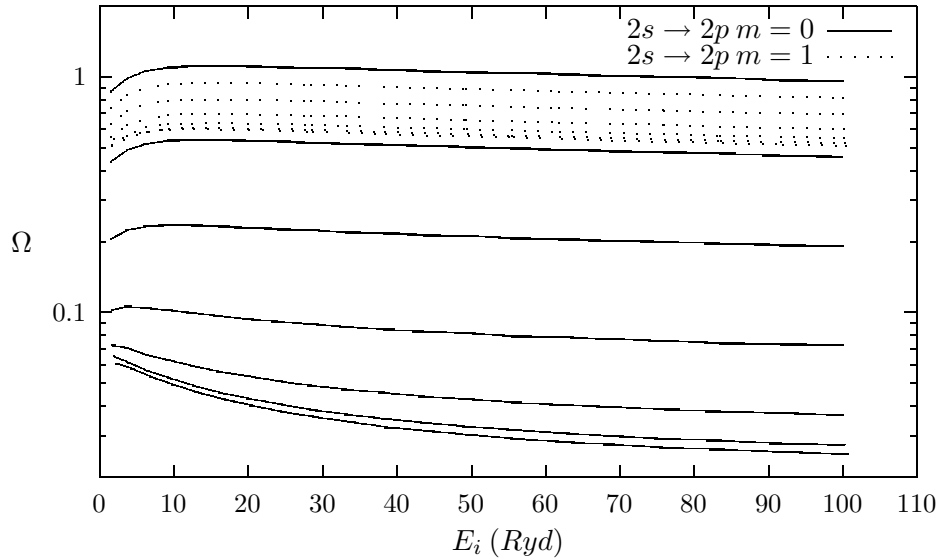


FIG. 4.9 – Même légende pour des transitions intra-couche $n=2$. Les amplitudes des courbes de $2s \rightarrow 2p m = 0$ (en trait plein) et $2s \rightarrow 2p m = 1$ (en pointillé) décroissent quand le champ électrique augmente.

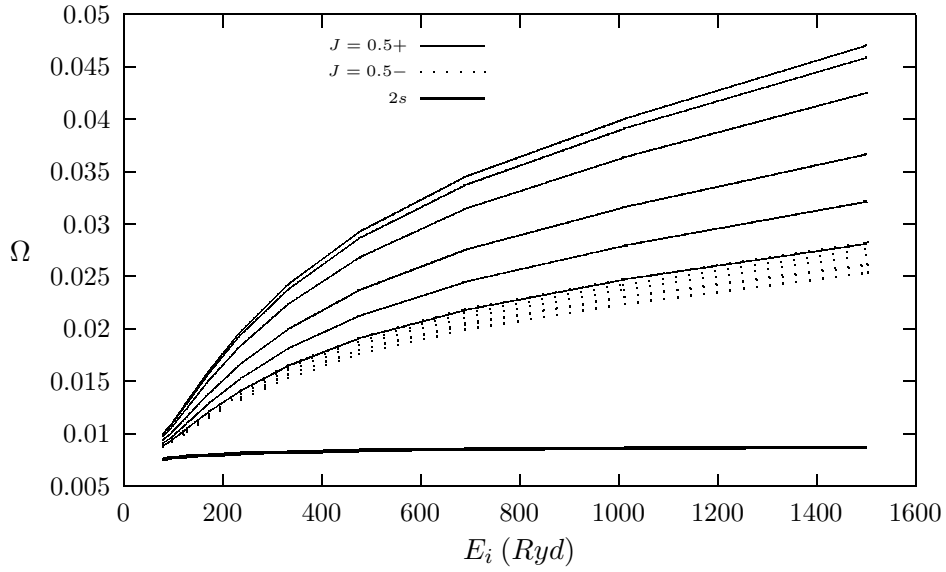


FIG. 4.10 – Forces de collision pour les transitions entre $1s\ ^2S_{1/2}$, $M = \pm 1/2$ et les états issus de $2s$ et $2p\ J=1/2-$ et $J=1/2+$, $M = \pm 1/2$, **avec interaction spin-orbite**, en fonction de l'énergie. Les différentes courbes correspondent à différentes valeurs du champ électrique : 0, 0.015625, 0.03125, 0.0625, 0.125 et 0.25 u.a. Les courbes $1s\text{-}J=1/2+$ (en trait plein) et $1s\text{-}J=1/2-$ (en pointillé) se superposent à champ électrique nul. L'amplitude générale des courbes $1s\text{-}J=1/2+$ croît lorsque le champ augmente (jusqu'à être comparable à celle d'une transition $1s\text{-}2p$) tandis que celle des courbes $1s\text{-}J=1/2-$ décroît très légèrement jusqu'à 0.04 u.a. puis revient vers sa valeur initiale. La transition $1s\ 2s$ est donnée à titre de comparaison (trait continu épais).

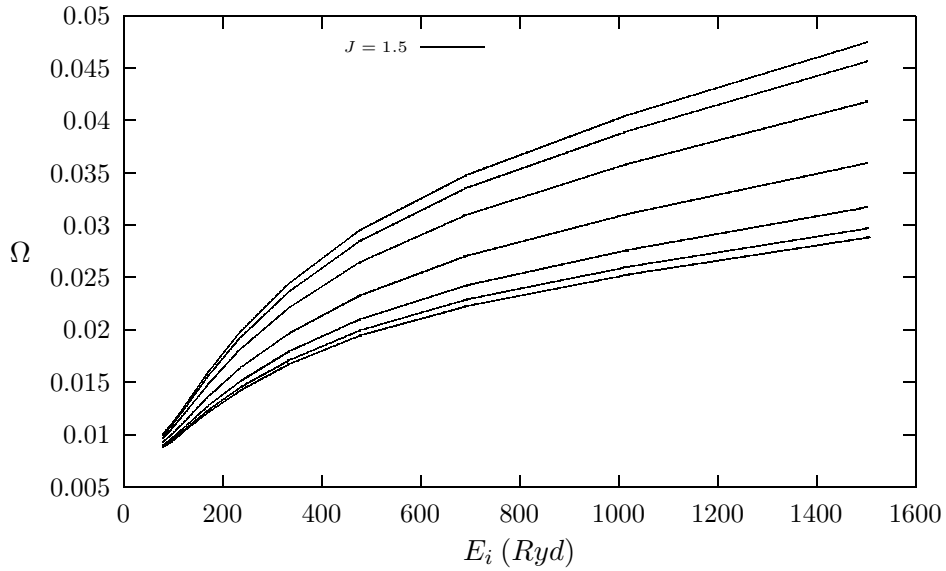


FIG. 4.11 – Même légende que précédemment mais pour la transition $1s - n=2\ J=3/2\ |M| = \pm 1/2$. L'amplitude générale des courbes décroît quand le champ électrique augmente et se stabilise vers $\mathcal{E} = 0.5u.a.$

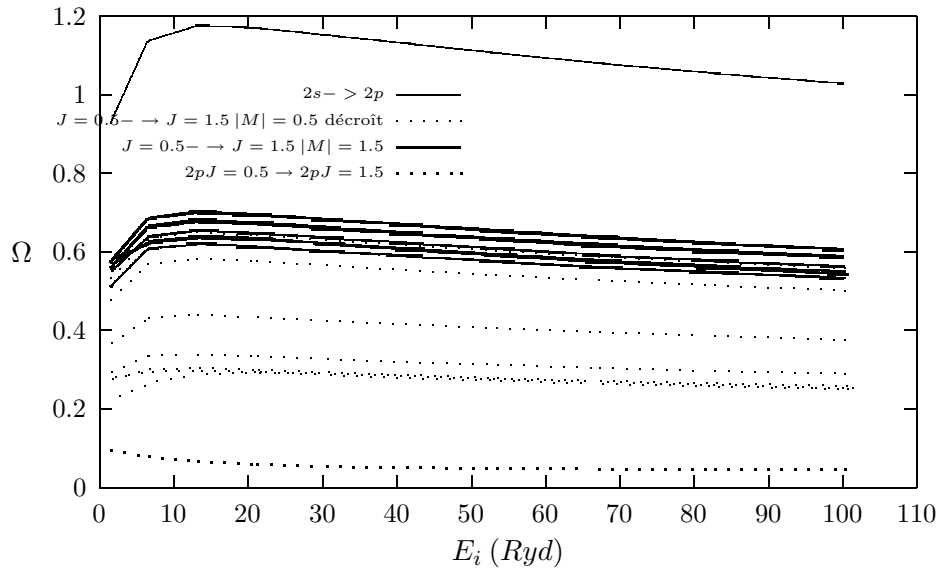


FIG. 4.12 – Forces de collision pour les transitions intra-couches $n=2$ $J=1/2^-$ vers $n=2$ $J=3/2$ en fonction de l'énergie. Les différentes courbes correspondent aux différentes valeurs du champ électrique : 0, 0.015625, 0.03125, 0.0625, 0.125, 0.25 et 0.5 u.a. L'amplitude générale des courbes $J=1/2^- \rightarrow J=3/2$ $M=3/2$ (trait continu épais) décroît avec le champ jusqu'à 0.04 u.a. de 12% puis retrouve sa valeur originale tandis que celle des transitions vers $J=3/2$ $M=1/2$ (pointillé léger) décroît avec le champ de 50% et se stabilise à partir de 0.25 u.a. Les transitions $2s-2p$ (continu fin) et $2p$ $J=1/2^- \rightarrow 2p$ $J=3/2$ (pointillé épais) avec un champ nul, sont fournies pour comparaison.

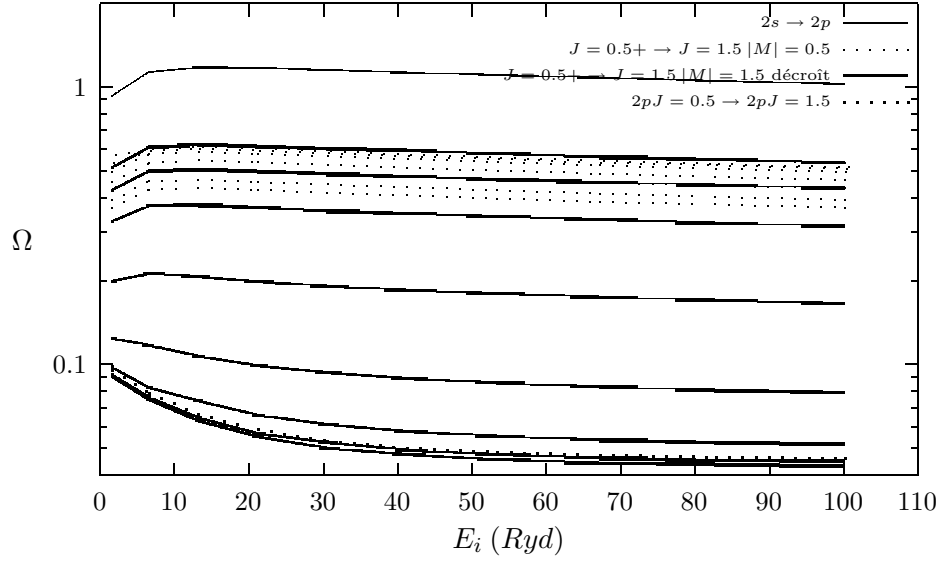


FIG. 4.13 – De même que précédemment pour les transitions $J=1/2+ \rightarrow J=3/2$. L'amplitude générale des courbes de $J=1/2+ \rightarrow J=3/2$ $M=3/2$ (trait continu épais) s'effondre lorsque le champ augmente et converge vers celle de la transition interdite $2p \rightarrow 2p$ (pointillé épais) dès 0.25 u.a. L'amplitude des transitions vers $J=3/2$ $M=1/2$ (pointillé fin) régresse de 30% jusqu'à 0.04 u.a. avant de revenir vers sa valeur initiale, à savoir la moyenne de $2s - 2p$ (trait continu fin) et de $2p - 2p$.

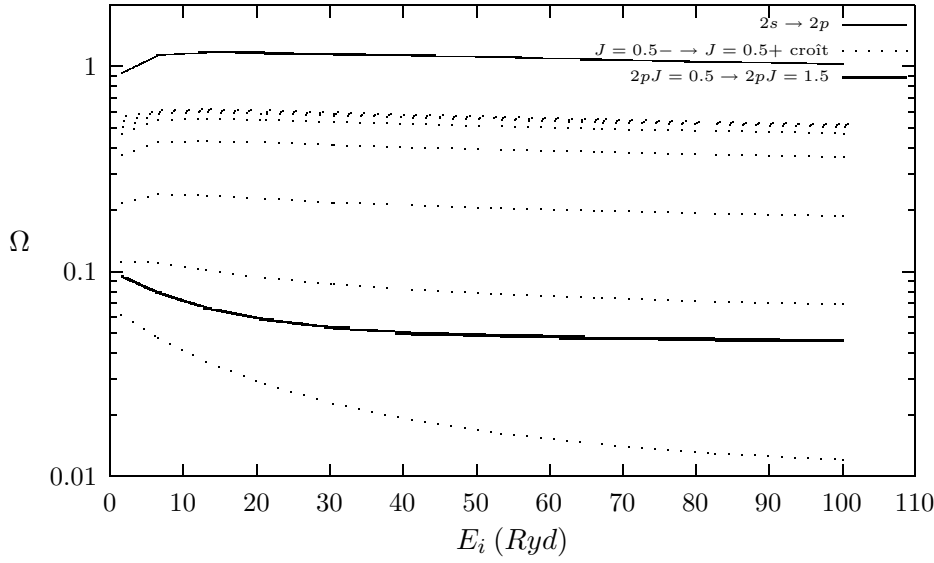


FIG. 4.14 – De même que précédemment pour la transition $J=1/2-$ vers $J=1/2+$ (trait pointillé), dont l'amplitude générale, très faible à champ nul, croît vers la moyenne de $2s - 2p$ (trait continu fin) et $2p - 2p$ (trait continu épais) et se stabilise dès 0.25 u.a.

4.6 Taux de transition

La force de collision calculée précédemment se présente sous une forme "compacte" et offre deux avantages, la symétrie et l'additivité. Néanmoins, c'est une quantité sans dimension difficilement utilisable dans sa forme brute pour des calculs collisionnels radiatifs. Les variations de population d'un niveau donné prennent en compte tous les taux de peuplement et de dépeuplement :

$$\frac{dN_i}{dt} = -N_i \sum_j R_{i \rightarrow j} + \sum_j R_{j \rightarrow i} N_j \quad (4.78)$$

où R_{ij} somme tous les taux de transition : $R_{ij} = \sum_p T_{ij}^{(p)}$ en $\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$, p représentant chaque processus collisionnel ou radiatif.

4.6.1 Moyenne sur la distribution des vitesses

Le taux de transition par excitation collisionnelle est une moyenne sur la fonction de distribution des électrons libres :

$$\begin{aligned} T_{ij} &= N_e \langle \sigma_{ij}(v)v \rangle = N_e \int \int \int_{v,\theta,\varphi} \sigma_{ij}(v)v f(v) d^3v \\ &= N_e \int_{E_{seuil}}^{\infty} \sigma_{ij}(E)v(E)f(E)dE \end{aligned} \quad (4.79)$$

Dans le cas d'une distribution maxwellienne des vitesses,

$$f(E)dE = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{E^{1/2}}{T^{3/2}} e^{-E/T} dE, \quad (4.80)$$

et

$$\langle \sigma v \rangle = \frac{2\sqrt{\pi}}{g} \cdot \frac{1}{T^{1/2}} \int_{E_{seuil}}^{\infty} \Omega(E) e^{-E/T} dE/T \quad (4.81)$$

en unités atomiques : $a_0^3 \tau^{-1}$, g étant le poids statistique de l'état initial. Les taux s'expriment, en général, en $cm^3 s^{-1}$:

$$\begin{aligned} \langle \sigma v \rangle &= \frac{2.17 \cdot 10^{-8}}{g T_{Ryd}^{1/2}} \int_{E_{seuil}}^{\infty} \Omega(E) e^{-E/T} dE/T \\ &= \frac{8.63 \cdot 10^{-6}}{g T_K^{1/2}} \int_{E_{seuil}}^{\infty} \Omega(E) e^{-E/T} dE/T. \end{aligned} \quad (4.82)$$

Par le principe de microréversibilité à l'ETL, le taux de désexcitation s'en déduit aisément :

$$\langle \sigma_{ji} v \rangle = \frac{g_i}{g_j} e^{E_{seuil}/T} \langle \sigma_{ij} v \rangle. \quad (4.83)$$

4.6.2 Moyenne sur la distribution du microchamp

Les taux de transitions doivent être une moyenne en énergie mais peuvent aussi l'être en champ électrique dans le cas des fortes densités. Dans la mesure où le microchamp influe sur la force de collision mais aussi sur l'énergie du seuil, par l'intermédiaire du déplacement des niveaux, il a paru pertinent de calculer un taux de transition pour chaque valeur du microchamp, de façon à éviter des situations malaisées comme les transitions à l'intérieur d'une même couche, où des niveaux peuvent se croiser, transformant une excitation en désexcitation.

L'axe du champ électrique est l'axe de référence, comme cela a été mentionné en préambule de la section sur les excitations collisionnelles en présence de champ électrique (4.5). La moyenne sur l'orientation du champ électrique vaut $\int \int \sin \theta d\theta d\varphi = 4\pi$:

$$\begin{aligned} \overline{\langle \sigma_{ij} v \rangle} &= \int \int \int \langle \sigma_{ij}(\mathcal{E}) v \rangle P(\mathcal{E}) d^3 \mathcal{E} \Big/ \int \int \int P(\mathcal{E}) d^3 \mathcal{E} \\ &= \int \langle \sigma_{ij}(\mathcal{E}) v \rangle P(\mathcal{E}) d\mathcal{E} \Big/ \int P(\mathcal{E}) d\mathcal{E}. \end{aligned} \quad (4.84)$$

4.7 Réalisation numérique

4.7.1 Structure atomique

Nous avons remarqué, lors des comparaisons de modèles, combien le choix de la structure pouvait avoir une influence importante, ainsi que la précision des énergies employées. Nous avons donc décidé d'utiliser un schéma de couplage LSJ avec une filiation directe entre chaque sous-couches (équation 3.1). Faute d'avoir réalisé nous-même notre propre programme de structure, et en l'absence des éléments de matrice Spin-Orbite, notre modèle est un couplage LSJ pur, ce qui dans un certain nombre de cas multiélectroniques est préjudiciable à la pertinence des états atomiques étudiés.

Le calcul des fonctions d'onde est effectué par un programme Hartree-Fock réalisé par François Perrot [57]. Les énergies de l'atome d'Aluminium Héliumöide ont été calculées par Jean Bruneau avec un code de structure relativiste.

4.7.2 Fonctionnement du code

Nous avons tâché de réaliser un outil de travail fonctionnant de manière autonome et ne nécessitant qu'un minimum de paramètres d'entrée. Le fichier d'initialisation comporte le numéro atomique du corps à étudier, le nombre d'orbitales considérées ainsi que leur liste puis le nombre de niveaux LSJ et leur liste avec énergie. Deux éléments ont été ajoutés, l'énergie d'ionisation de l'état de référence (le fondamental) et le groupe auquel appartient chaque niveau et dans lequel sera effectuée la diagonalisation du Hamiltonien, il s'agit, en l'occurrence, de pouvoir restreindre la taille des matrices à diagonaliser. Nous avons déjà précisé au chapitre consacré à l'effet Stark que nous isolions trois ensembles pour les hydrogénoïdes et les héliumöides en fonction de leur nombre quantique principal : le fondamental ($n=1$), les états participant à la couche $n=2$ puis les états issus des couches $n=3$ et $n=4$ ensemble.

L'énergie d'ionisation du fondamental est là pour permettre de définir une grille de températures pertinente pour le calcul des taux collisionnels (ces températures sont limitées à $1/4$ de l'énergie d'ionisation, ce qui correspond approximativement à la limite de l'existence de tous les niveaux considérés). Le choix des températures définit aussi une grille d'énergies pour les électrons libres incidents. Nous avons choisi de déterminer la force de collision pour des énergies s'échelonnant entre 1.06 et 20 fois l'énergie du seuil, pour des transitions entre niveaux bien séparés, en surreprésentant les énergies les plus faibles car elles sont statistiquement les plus importantes dans la distribution et correspondent aussi à la zone où la force de collision varie le plus. Nous avons choisi de nous décaler de 6% du seuil pour le premier point en raison

de problèmes de stabilité pouvant advenir dans le calcul de fonctions d'onde de très faible énergie (pour le libre sortant, les fonctions oscillantes ont une période très grande devant les dimensions caractéristiques de l'atome, ce qui pose un problème de maillage radial). Dans le cas des transitions où l'énergie du seuil est très faible, un tel maillage risquait d'échantillonner une trop faible portion de la distribution des électrons thermiques et nous avons choisi de référencer notre grille d'énergies par rapport à l'énergie d'ionisation du fondamental : nos valeurs s'échelonnent, au delà de l'énergie du seuil entre 1.5% et 2 fois l'énergie d'ionisation.

L'utilisateur n'a à choisir que les configurations initiale et finale de la transition qu'il désire étudier. Le programme liste initialement la totalité des sous-niveaux LSJM en les classant par nombre quantique magnétique total M et par énergie décroissante puis calcule pour chaque valeur de champ choisie les nouvelles structure et énergie avant de chercher les forces de collision entre chaque sous-niveau de la transition. Il en déduit ensuite les forces de collision effectives entre chaque sous-niveau (moyenne de Ω sur la température), puis les taux de transition (en cm^3s^{-1}) entre sous-niveaux, tout ceci pour chaque valeur du champ. Nous avons aussi réalisé un petit post-processeur qui permet de déterminer la valeur de ce taux en fonction de la densité en effectuant la moyenne sur les microchamps, pour chaque température.

Ce code peut fonctionner sur des PC modernes pour des transitions où un seul niveau (initial ou final) est fortement perturbé par le champ. Lorsque les deux niveaux sont "éclatés", le nombre d'éléments de matrice angulaire devient très important et il est nécessaire de disposer d'une mémoire vive conséquente (au moins 256 MegaOctets pour des transitions 1s2s - 1s2p héliumoides). La méthode de convergence des forces de collision partielles a permis de gagner plusieurs ordres de grandeur en vitesse de calcul et ceux-ci passent désormais en quelques (dizaines de) minutes sur des stations SUN Ultra 5 (400MHz), les transitions entre deux couches perturbées étant plus lentes mais résolues en quelques dizaines de minutes sur les clusters Compaq à 2 Gigaflops du CEA.

4.7.3 Lissage des forces de collision et des taux collisionnels

Pour éviter le calcul d'un trop grand nombre de forces de collisions en fonction de l'énergie initiale, nécessaires pour effectuer leur intégration dans les taux collisionnels, il est pratique de réaliser un lissage des forces de collisions à l'aide d'une expression analytique. Une formule fréquemment utilisée pour l'ensemble des forces d'oscillateur et de collision a été proposée par Goett *et al* [32] :

$$\Omega(E_i) = a \ln(E_i) + b + \frac{c}{e + E_i} + \frac{d}{(e + E_i)^2}. \quad (4.85)$$

Nous l'avons légèrement adaptée pour obtenir une précision supérieure sur les transitions collisionnelles en présence de champ électrique :

$$\Omega(E_i) = a \ln(E_i) + b + \frac{c}{E_i} + \frac{d}{E_i^2} + \frac{e}{E_i^3} + \frac{f}{E_i^4}. \quad (4.86)$$

Les coefficients a, b, c, d, e, f sont déterminés par la méthode des moindres carrés en fonction des 10 valeurs de l'énergie précisées au paragraphe précédent. L'incertitude absolue vaut un millièème de la force de collision la plus élevée.

L'intérêt d'une telle formulation est de permettre une intégration très simple des forces de collisions à l'aide des intégrales exponentielles :

$$E_n(z) = z^{n-1} \int_z^\infty \frac{e^{-t}}{t^n} dt, \quad E_{n+1}(z) = \frac{1}{n}(e^{-z} - z.E_n(z)) \quad (n \geq 1), \quad (4.87)$$

E_1 étant elle-même obtenue à l'aide d'une formule analytique [1]. Ainsi, le taux de collision s'écrit :

$$\begin{aligned} < \sigma v > = \frac{2.1737 \cdot 10^{-8}}{g T_{eRyd}^{1/2}} \times \\ & \left[a (\ln(E_s) e^{-X} + E_1(X)) + b e^{-X} + c \frac{E_1(X)}{T_e} + d \frac{E_2(X)}{T_e E_s} + e \frac{E_3(X)}{T_e E_s^2} + f \frac{E_4(X)}{T_e E_s^3} \right] \end{aligned} \quad (4.88)$$

T_e étant la température électronique exprimée en Rydbergs.

4.7.4 Comparaison avec quelques résultats existants

Nous avons présenté quelques résultats concernant le Néon mais sans interaction spin-orbite ni comparaison avec des modèles semblables hors champ. Nous allons, ici, tâcher de **valider notre modèle en champ nul dans le cas du Fer héliumöide**, par comparaison avec des résultats de Mann [51] et Kato *et al* [44]. Les calculs de Mann sont relativistes en Distorted Waves, ceux de Kato *et al* correspondent à l'interpolation polynomiale de résultats obtenus par Pradhan [64, 65] à l'issue d'un calcul DW incluant les résonances d'autoionisation et de recombinaison diélectronique. Ces auteurs effectuent leurs travaux en couplage intermédiaire, où seul J est un bon nombre quantique. Nos calculs sont en couplage LSJ pur et les corrections relativistes ne sont présentes que pour le calcul des énergies des niveaux ioniques non perturbés.

Nous présentons quelques transitions $1s^2 \rightarrow 1s2l$ ainsi qu'une transition $1s2s \rightarrow 1s2p$.

Nos résultats concordent avec ceux de Mann à 10% près pour les transitions de $1s^2$ vers $1s2p^1P_1$, $1s2s^1S_0$ et $1s2s^3S_1$. La comparaison avec les interpolations de Kato *et al* est aussi satisfaisante pour les deux premières transitions précédentes

ainsi que pour les transitions vers 3P_2 et 3P_0 . Néanmoins, du fait de leur forme polynomiale, ces interpolations sont oscillantes et nos résultats présentent une plus grande variabilité par rapport à eux (jusqu'à 20%). (voir figure 4.15)

Mann ne présente pas de résultats de $1s^2$ vers $1s2p$ en couplage intermédiaire mais seulement en couplage LS en tenant compte de l'interaction de configuration. Nous avons donc effectué la somme des forces de collision correspondant à cette transition et nos résultats sont très inférieurs à ceux de Mann (non présentés ici). Ceci est dû à notre hypothèse qui fait de L et S de bons nombres quantiques. De même, l'étude de la transition intra-couche $1s2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s2p\ ^1P_1$ fait apparaître une forte divergence entre les résultats de Mann et les nôtres, au moins 5 fois plus faibles. En admettant que L et S ne sont pas de bons nombres quantiques nous avons donc recalculé les forces de collision pour l'état en couplage intermédiaire $|^1P_{1inter} \rangle = 0.962|^1P_{1pur} \rangle + 0.274|^3P_{1pur} \rangle$ suivant les valeurs obtenues par le code de O. Peyrusse. Nos résultats sont alors équivalents à ceux de Mann à basse énergie à 5% près et s'écartent progressivement ensuite (30% d'écart à 10 fois l'énergie du seuil soit 625 eV) (figure 4.16).

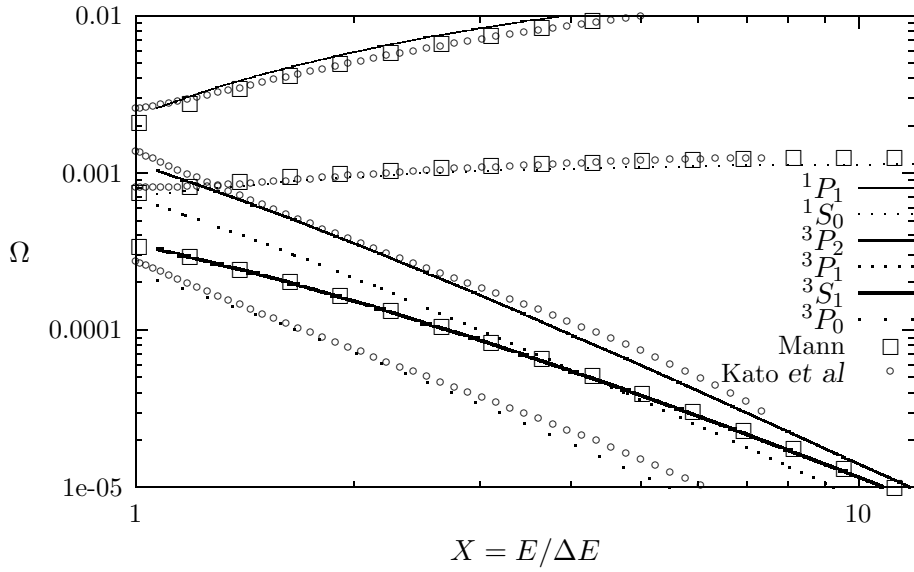


FIG. 4.15 – Forces de collision pour les différentes transitions $1s^2 \rightarrow 1s2s$ et $1s2p$ comparées aux résultats de Mann (carrés) ainsi que Kato *et al* (petits cercles) : $1s^2 \rightarrow {}^1P_1$ en trait continu fin, $1s^2 \rightarrow {}^3P_2$ en trait continu épais, $1s^2 \rightarrow {}^3S_1$ en trait continu plus épais, $1s^2 \rightarrow {}^1S_0$ en pointillé léger, $1s^2 \rightarrow {}^3P_1$ en pointillé épais serré et $1s^2 \rightarrow {}^3P_0$ en pointillé épais élargi. Pour toutes ces courbes, le champ électrique est nul.

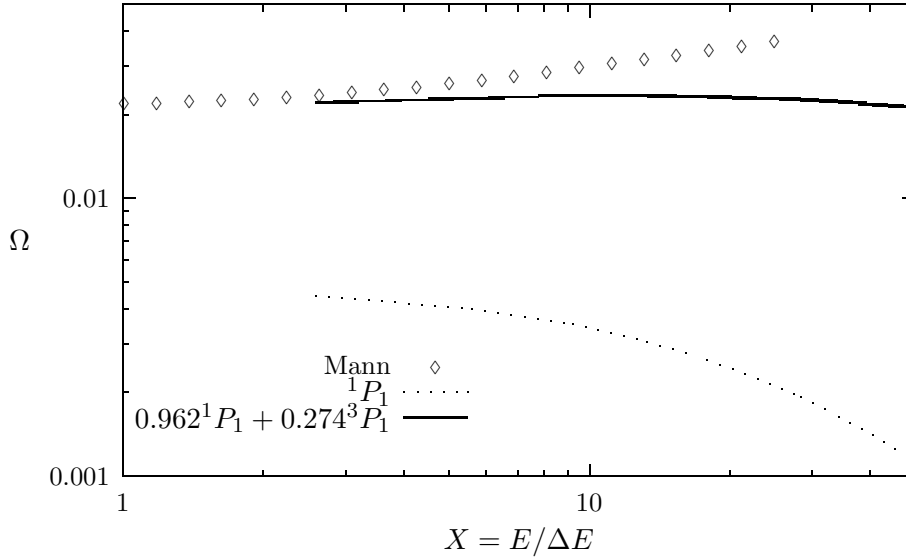


FIG. 4.16 – Force de collision pour la transition $1s2s^3S_1 \rightarrow 1s2p^1P_1$ en considérant L, S et J comme de bons nombres quantiques (en pointillé), J seul bon nombre quantique (trait continu épais), puis résultats de Mann (losanges). (Le champ électrique est nul.)

4.8 Conclusion

Nous avons, dans cette partie, présenté le modèle théorique choisi pour le calcul des forces de collisions ainsi que les approximations effectuées pour rendre les résultats plus précis et rapides. Notre programme numérique est un code Distorted-Waves, incluant une orthogonalisation des fonctions d'onde ainsi qu'une extrapolation des forces de collision pour améliorer la convergence aux grands moments angulaires. Les résultats obtenus en l'absence de champ sont comparables à ceux de la littérature et sont proches de ceux obtenus par les méthodes les plus élaborées. Seule une différence subsiste pour des transitions inter-couches lorsque les éléments de matrice spin-orbite deviennent importants. Nous supposons que cette difficulté apparaîtra aussi lorsque d'autres éléments de matrice négligés (interaction de configurations, spin-spin ...) seront grands. Néanmoins cette situation n'advient que pour des corps relativement lourds ($Z \geq 20$).

Nos calculs seront donc effectués en couplage LSJ pur, tout en étant aisément modifiables pour intégrer les éléments de matrice oubliés le jour venu.

En présence de champ électrique nous avons développé une formule générale, indépendante de l'élément considéré ainsi que de son degré d'ionisation. Nous constatons une modification notable des sections efficaces pour le Néon hydrogénoïde, en cohérence avec les résultats préliminaires de Perrot, mais pour un modèle plus raffiné.

Nous présentons donc, dans le chapitre suivant, une étude plus générale portant sur l'Aluminium hydrogénoïde et héliumoïde.

Chapitre 5

Résultats

5.1 Introduction

Nous donnons dans ce chapitre quelques résultats représentatifs des calculs que nous avons menés ainsi qu’une étude plus globale des effets de la densité sur les spectres d’émission à l’aide d’un modèle collisionnel-radiatif élémentaire.

Nous présentons de manière graphique, en les analysant :

- quelques échantillons de forces de collision, fonctions du champ et de l’énergie de l’ion incident, pour des transitions entre sous-niveaux $\gamma LSJ|M|$ et $\gamma' L'S'J'|M'|$,
- quelques taux collisionnels, en fonction du champ et de la température, entre sous-niveaux $\gamma LSJ|M|$ et $\gamma' L'S'J'|M'|$,
- quelques taux collisionnels moyennés en champ électrique, en fonction de la densité à différentes températures ainsi que des coefficients de variation de ces taux collisionnels en fonction de la densité par rapport à leur valeur non-perturbée par le champ,
- l’ensemble des taux collisionnels moyennés en champ en fonction de la densité, pour les transitions de couche K correspondant aux transitions radiatives,
- enfin, les profils spectraux des raies de l’Aluminium $Ly\alpha$, $Ly\beta$, $Ly\gamma$, $He\alpha$, $He\beta$ et $He\gamma$ pour plusieurs densités en comparant les spectres obtenus lorsque le système est à l’ETL ou lorsque les taux collisionnels sont indépendants du champ avec ceux issus de taux collisionnels variant avec le microchamp.

Nous avons focalisé nos calculs sur le cas de l’Aluminium, élément fréquemment employé dans les expériences d’interaction laser-matière [4, 52, 50, 26]. Il présente l’avantage d’être suffisamment commun et d’être un élément léger. Comme cela est présenté au premier chapitre, cette propriété fait qu’il s’ionise fortement à partir d’une centaine d’eV si le matériau reste assez dense, devenant ainsi hydrogénoïde ou héliumoïde, voire un peu lithiuoïde. Ces ions présentent un spectre simple

en couche K au sens où les raies sont bien résolues et caractéristiques de niveaux bien identifiables. L'étude des effets de densité dans l'aluminium hydrogénoïde ou héliumoïde est donc facilement envisageable. Nous n'avons volontairement effectué aucun calcul sur des lithiumoïdes, les transitions de couche K conduisant à des états de type $1s n l n' l'$ pour lesquels notre schéma de couplage est manifestement inadapté tant qu'il ne comporte pas d'éléments de matrice d'interaction de configuration...

Nous présentons en outre quelques lois d'échelle en Z qui permettent d'extrapoler les résultats obtenus pour l'Aluminium hydrogénoïde à des éléments plus variés.

5.2 Transitions de couche K : quelques lois simples

Les transitions à partir de la couche $n=1$ présentent la particularité d'avoir un niveau initial très faiblement affecté par le champ électrique. Nous le considérons donc non perturbé. Dans ces conditions la formule générale 4.66 se simplifie notablement en éliminant les sommes sur α et α' . De plus, les états sous champ électrique étant indépendants du signe de M , les forces de collision peuvent être calculées entre les états $J|M|$ et $J'|M'|$ directement. La sommation sur les M initiaux permet de réduire encore la longueur de l'équation initiale à l'aide de (Cowan [19] 5.16) :

$$\sum_m (-1)^{m-j} \begin{pmatrix} j & j & j' \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = \delta_{j',0} [j]^{1/2}.$$

On montre ainsi que a s'annule, ce qui permet de simplifier nombre de coefficients.

Nous trouvons donc pour les transitions de couche K des hydrogénoïdes et héliumoïdes la formule très concise :

$$\boxed{\begin{aligned} \Omega_{i|M_i|f|M_f|} &= \sum_{\beta\beta'} \delta_{LSJ_\beta, LSJ_{\beta'}} \frac{a_\beta a_{\beta'}}{[J_\beta]} \sum_{l_i, l_f, S} [\mathcal{L}, S] \\ &< \gamma_i(0, l_i) l_i, (S_i, \frac{1}{2}) S | \frac{2}{r_{12}} | \gamma_\beta(L_\beta, l_f) l_i, (S_f, \frac{1}{2}) S > \\ &< \gamma_\beta(L_\beta, l_f) l_i, (S_f, \frac{1}{2}) S | \frac{2}{r_{12}} | \gamma_i(0, l_i) l_i, (S_i, \frac{1}{2}) S > \end{aligned}} \quad (5.1)$$

avec $\mathcal{L} = l_i$.

S'il n'y a pas de mélange entre états de couches distinctes ($n \neq n'$), les contraintes sur LS et J imposent que $\beta = \beta'$ et par conséquent :

$$\Omega_{i|M_i|f|M_f} = \sum_{\beta} |a_{\beta}|^2 \Omega_{i|M_i|\beta|M_f}. \quad (5.2)$$

Les forces de collisions ne sont plus qu'une simple moyenne de forces de collisions entre états non mélangés. De plus, comme les coefficients a_{β} sont normés, la force de collision totale entre deux niveaux n et n' est conservée lorsque le champ électrique varie.

Des formules équivalentes peuvent être dérivées pour les taux collisionnels, mais il est nécessaire de préciser les approximations effectuées. Les forces de collisions précédentes devraient en toute rigueur être calculées à chaque champ électrique, ce dernier modifiant l'énergie de seuil de la transition ($E_S \rightarrow E_S + \delta E(\mathcal{E})$). Une étude des forces de collision en fonction de l'énergie du seuil montre qu'elles décroissent lorsque δE augmente, mais dans une proportion très réduite : au seuil, la variation est égale à la moitié de la variation en énergie pour les transitions interdites et est similaire pour les transitions permises ; à haute énergie, cette variation disparaît. Or les variations en énergie restent restreintes : quelques pourcents au plus pour les valeurs admissibles du champ.

Dans ces conditions, nous pouvons traiter la variation des taux collisionnels de manière perturbative :

$$\int_{E_S+\delta E}^{\infty} \Omega(E) e^{-E/T} dE/T \approx e^{-\delta E/T} \int_{E_S}^{\infty} \Omega(u) e^{-u/T} du/T. \quad (5.3)$$

Les variations de l'énergie de seuil des transitions restant toujours très inférieures à la température, les modifications des taux de transition occasionnées par les variations d'énergie de seuil sont de l'ordre du pourcent.

Il est donc licite d'admettre la formule simplifiée des taux collisionnels :

$$\langle \sigma_{i|M_i|f|M_f} v \rangle = \sum_{\beta} |a_{\beta}|^2 \langle \sigma_{i|M_i|\beta|M_f} v \rangle. \quad (5.4)$$

5.3 Quelques exemples pour l'Aluminium hydrogénoïde

Les taux collisionnels de Al XIII présentent les mêmes caractéristiques que ceux de Ne X. Nous les avons présentées au chapitre précédent pour les transitions vers la couche $n=2$ et nous les rappelons succinctement : (Figure 5.1) la force de collision $1s - n=2 J=1/2-$ fléchit légèrement (12%) jusqu'à 0.16 u.a. puis revient vers sa valeur

initiale à la suite d'une rotation dans l'espace ${}^2P_{1/2}$, ${}^2P_{3/2}$ (la répartition $2s/2p$ est conservée); la transition $1s$ vers $n=2$ $J=1/2+$ croît fortement vers la transition permise $1s \rightarrow 2p$ tandis que la transition $1s$ vers $n=2$ $J=3/2$ $|M| = 1/2$ décroît inversement de $1s \rightarrow 2p$ vers $1s \rightarrow (2s+2p)/\sqrt{2}$. De même, les forces de collision des transitions intra-couche (pas de figure) $n=2$ $J=1/2- \rightarrow n=2$ $J=3/2$ $|M| = 1/2$ et $n=2$ $J=1/2+ \rightarrow n=2$ $J=3/2$ $|M| = 3/2$ décroissent très fortement vers des transitions interdites tandis que $n=2$ $J=1/2- \rightarrow n=2$ $J=1/2+$, initialement interdite, croît très fortement vers l'équivalent à champ nul de $n=2$ $J=1/2 \rightarrow n=2$ $J=3/2$. Enfin $n=2$ $J=1/2- \rightarrow n=2$ $J=3/2$ $|M| = 3/2$ et $n=2$ $J=1/2+ \rightarrow n=2$ $J=3/2$ $|M| = 1/2$ varient peu et temporairement de façon similaire à $1s \rightarrow n=2$ $J=1/2-$.

Pour les transitions de $1s$ vers les états $|M| = 1/2$ de la couche $n=3$ (Figures 5.4, 5.5 et 5.6), la force de collision de $1s \rightarrow n=3$ ${}^2D_{5/2}$ $|M| = 1/2$ reste quasi constante jusqu'à $1.25 \cdot 10^{-3} u.a.$ puis croît fortement ($\times 10$) et se stabilise entre 0.08 et 2 u.a. (équivalent à la transition $1s \rightarrow (0.36 \text{ } 3s + 0.52 \text{ } 3p + 0.12 \text{ } 3d)$) puis, du fait de l'évitement avec les états issus de la couche $n=4$, décroît jusqu'à 2. u.a. La transition $1s$ vers $n=3$ $J=3/2+$ $|M| = 1/2$ décroît dès $3 \cdot 10^{-4} u.a.$ jusqu'à $10^{-2} u.a.$ ($1s \rightarrow (0.9 \text{ } 3d + 0.1 \text{ } 3p)$) puis se rétablit et se stabilise vers 0.2 u.a. ($1s \rightarrow (0.55 \text{ } 3p + 0.45 \text{ } 3d)$). La transition $1s$ vers $n=3$ $J=3/2-$ $|M| = 1/2$ croît dès $3 \cdot 10^{-4} u.a.$ jusqu'à $5 \cdot 10^{-3} u.a.$ puis chute jusqu'à $8 \cdot 10^{-2} u.a.$ La transition $1s \rightarrow n=3$ $J=1/2+$ $|M| = 1/2$ décroît à partir de $2 \cdot 10^{-2} u.a.$ progressivement jusqu'à 2.5 u.a. Enfin la transition $1s$ vers $n=3$ $J=1/2-$ reste quasi constante jusqu'à 0.64 u.a. puis décroît (devient équivalente à une transition vers $n=3$ $J=3/2$ $|M| = 1/2$ sans perturbation). Les transitions vers les états de $|M| = 3/2$ adoptent un comportement général équivalent à celui des transitions équivalentes (même J , même signe) avec $|M| = 1/2$.

Les forces de collisions obtenues, à champ nul, sont équivalentes à 1% près avec celles de Aggarwal *et al* [3] calculées avec un code R-Matrix, à l'exception des transitions vers $n,l=0$ qui sont supérieures chez nous d'une dizaine de pourcent.

Les taux collisionnels qui en sont issus suivent la même orientation générale hormis aux très forts champs électriques qui induisent une variation de l'énergie de seuil non négligeable. De même, la dépendance en densité des taux collisionnels conserve ces tendances : les transitions vers la couche $n=2$ (Figure 5.2) commencent à varier dès $N_e = 10^{21} e^{-}/cm^3$: $1s \rightarrow n=2$ $J=1/2+$ croît au plus de 20%, $1s \rightarrow J=3/2$ $|M| = 1/2$ décroît en proportion inverse tandis que $1s \rightarrow J=1/2-$ reste quasi constante, sauf à forte densité (supérieure à $10^{24} e^{-}/cm^3$) où la réduction d'énergie de seuil entraîne une croissance de 5% environ.

Notons sur les figures 5.2, 5.3, 5.5 et 5.6 que les courbes varient d'autant plus faiblement et pour des densités plus élevées que la température du milieu est basse : une plus forte agitation des ions favorisant des microchamps plus élevés.

Les transitions vers la couche $n=3$ (Figures 5.5 et 5.6) varient notablement dès $10^{18}e-/cm^3$ pour $1s \rightarrow n=3 J=3/2+ |M| = 1/2$ qui croît de 30 % avant de s'affaïsser et $1s \rightarrow n=3 J=3/2- |M| = 1/2$ qui décroît de 55% avant de retourner vers sa valeur initiale (figure 5.5). La transition $1s \rightarrow n=3 J=5/2 |M| = 1/2$ croît très fortement à partir de $10^{20}e-/cm^3$ et atteint 8 à 10 fois sa valeur initiale dès $10^{21} - 10^{22}e-/cm^3$ (figure 5.6). Les transitions $1s \rightarrow n=3 J=1/2+$ et $1s \rightarrow n=3 J=1/2-$ varient moins et pour des densités plus élevées ($10^{21}e-/cm^3$).

Nous présentons sur la figure 5.6 une comparaison entre des taux collisionnels calculés “exactement” à l’aide de la formule 4.66, où les couches $n=3$ et $n=4$ sont prises en compte simultanément pour la diagonalisation du hamiltonien et dont les énergies de seuil dépendent du champ électrique, et des taux collisionnels “approximatifs” obtenus à l’aide des formules 5.2 et 5.4 où seule la couche $n=3$ est prise en compte et l’énergie de seuil est ou non modifiée avec le champ électrique. L’état $n=3 J=5/2 |M| = 1/2$ est le premier à être mélangé avec des états de la couche $n=4$ lorsque le champ croît ; néanmoins, ce mélange n’a quasiment aucune incidence sur les résultats. Les différences qui apparaissent entre le calcul “exact” et les formules simplifiées sont dues à un trop petit nombre de points calculés en fonction du champ électrique pour la formule exacte, ce qui pèse sur la précision du taux collisionnel moyenné sur le microchamp. Il apparaît une variation de quelques pourcents à très haute densité ($10^{24}e-/cm^3$) lorsque l’énergie de seuil n’est pas modifiée en fonction du champ électrique. Nous en concluons que nos formules simplifiées (5.2) et (5.4) donnent des résultats conformes à la réalité et que les forces de collision et taux collisionnels de couche K peuvent être calculés très aisément par ce biais.

5.4 Lois d’échelle

Les énergies des niveaux hydrogénoïdes obtenues en résolvant l’équation 3.10 présentent un décalage proportionnel à Z^4 entre niveaux d’une même couche. De plus, les éléments de matrice d’interaction avec le champ électrique sont proportionnels à \mathcal{E} et $\int P_{nl}P_{n'l'} r dr$ est proportionnel à $1/Z$ (formules 3.3 à 3.5). Deux niveaux se mélangent lorsque l’élément de matrice d’interaction entre eux devient proche de la différence d’énergie qui les sépare : $\Delta E_H Z^4 \sim < r >_H \mathcal{E}/Z$. **Les modifications des forces et des taux collisionnels s’effectuent donc pour des champs électriques proportionnels à Z^5 :**

$$\Omega_Z(Z^5 \mathcal{E}, Z^2 E) \approx Z^2 \Omega_H(\mathcal{E}, E) \quad (5.5)$$

car la loi d’échelle entre les forces de collision en l’absence de champ électrique s’écrit $\Omega_Z(Z^2 E) \approx \Omega_H(E)$.

Ainsi, pour l'Aluminium $Z=13$, les mêmes variations se produisent pour des microchamps $\left(\frac{13}{10}\right)^5 = 3.71$ fois supérieurs à ceux du Néon $Z=10$ (ainsi $1s - n=2$ $J=0.5$ - décroît jusque vers 0.16 u.a. avant de revenir vers sa valeur initiale pour Al XIII tandis que cette inversion s'effectue vers 0.04 u.a. pour Ne X).

Dans la mesure où les forces de collision sont proportionnelles à $1/Z^2$ et les taux collisionnels à $1/Z^3$ (avec d'autant plus de précision que Z est élevé), l'étude d'un seul élément en fonction du champ électrique est suffisante pour caractériser avec précision l'ensemble des forces de collision et des taux collisionnels des autres éléments (pour une énergie ou une température proportionnelle à Z^2).

A faible densité, la distribution de Holtsmark est une bonne approximation et le microchamp est proportionnel à $Z^{1/3}N_e$, les taux collisionnels moyennés en champ électrique suivront donc une loi d'échelle en densité proportionnelle à $Z^{16/3}$. Du fait des contraintes en densité sur cette distribution, cette loi ne sera vérifiée que pour les niveaux $n=3$ et supérieurs, dont les sous-niveaux sont plus rapprochés (en $1/n^3$). Ainsi les modifications s'effectuent dès $10^{18}e - /cm^3$ pour Al XIII dans $n=3$ tandis qu'elles apparaissent à partir de $10^{21}e - /cm^3$ pour $n=2$ (figures 5.2, 5.3 et 5.5).

5.5 Spectres Collisionnels-Radiatifs

Nous présentons dans ce paragraphe une étude spectroscopique préliminaire des effets de la prise en compte des taux d'excitation collisionnelle modifiés par le microchamp.

A cet effet, nous avons réalisé un calcul collisionnel-radiatif élémentaire en ne prenant en compte que les excitations et désexcitations collisionnelles et les transitions radiatives dipolaires électriques (E1).

Dans la mesure où aucun mécanisme d'ionisation n'est inclus, nous avons traité distinctement les hydrogénoïdes et les héliumoïdes. Nous voulions présenter des spectres de couche K : Ly α, β, γ et He α, β, γ , nous avons donc pris en compte tous les états de type $1s, 2l, 3l, 4l$ pour les hydrogénoïdes et $1s^2, 1s2l, 1s3l$ et $1s4l$ pour les héliumoïdes.

Comme nous l'avons indiqué dans les parties précédentes, nous avons réduit le nombre de niveaux $\gamma LSJM$ étudiés en traitant simultanément $\gamma LSJM$ et $\gamma LSJ-M$ lorsque M est non nul (voir paragraphe 3.3 "Résultats et notation" dans L'effet Stark). Avec cette restriction, nous avons 30 niveaux $\gamma LSJ|M|$ pour les hydrogénoïdes et 74 pour les héliumoïdes (voir Appendice A, B) En calculant simultanément les taux d'excitation collisionnelle et les désexcitations correspondantes, il reste 435 taux collisionnels à évaluer pour les hydrogénoïdes et 2701 pour les

héliumoides, ceci pour chaque valeur du microchamp de la distribution. Chaque taux requiert, en outre, l'évaluation de plusieurs forces de collision, pour chaque valeur du champ électrique. Il n'est donc pas envisageable de calculer en ligne chaque force de collision séparément, sachant que nombre d'entre elles nécessitent plusieurs minutes de calcul sur des ordinateurs performants. Ce temps étant d'autant plus long que les niveaux de départ et d'arrivée se mélangent avec de nombreux autres niveaux en présence de champ électrique.

5.5.1 Forces de collision

Nous avons réitéré l'approximation présentée dans le paragraphe 5.2 pour les transitions de couche K en l'adaptant aux cas plus complexes. Les simplifications apparaissant lorsque l'un des niveaux n'est pas perturbé par le champ n'ont plus cours. Néanmoins, il est possible de présenter chaque force de collision entre deux niveaux perturbés par le champ comme la somme de plusieurs forces de collision partielles.

En reprenant la formule 4.66, nous pouvons l'écrire sous la forme :

$$\Omega_{i \pm M_i, f \pm M_f} = \sum_{\alpha, \beta, \alpha', \beta'} a_{\alpha}^* a_{\beta} a_{\alpha'} a_{\beta'}^* \Omega_{\alpha \alpha' \pm M_i, \beta \beta' \pm M_f} \quad (5.6)$$

où les forces de collision partielles $\Omega_{\alpha \alpha' \pm M_i, \beta \beta' \pm M_f}$ valent :

$$\begin{aligned} \Omega_{\alpha \alpha' \pm M_i, \beta \beta' \pm M_f} = & 2 \sum_a [a] \sum_{\pm M_i} \sum_{\pm M_f} (-1)^{M_i + M_f} \text{signe}_{\alpha}(M_i) \text{signe}_{\alpha'}(M_i) \\ & \times \text{signe}_{\beta}(M_f) \text{signe}_{\beta'}(M_f) \begin{pmatrix} J_{\alpha} & J_{\alpha'} & a \\ M_i & -M_i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_{\beta} & J_{\beta'} & a \\ M_f & -M_f & 0 \end{pmatrix} \\ & \times \sum_{l_i, l_f, \mathcal{L}, \mathcal{S}, \mathcal{L}', \mathcal{S}'} \left\langle \gamma_{\alpha}(L_{\alpha}, l_i) \mathcal{L}, (S_{\alpha}, s) \mathcal{S} \left\| \sum_{i=1}^N \frac{2}{r_{i, N+1}} \right\| \gamma_{\beta}(L_{\beta}, l_f) \mathcal{L}, (S_{\beta}, s) \mathcal{S} \right\rangle \\ & \left\langle \gamma_{\beta'}(L_{\beta'}, l_f) \mathcal{L}', (S_{\beta'}, s) \mathcal{S}' \left\| \sum_{i=1}^N \frac{2}{r_{i, N+1}} \right\| \gamma_{\alpha'}(L_{\alpha'}, l_i) \mathcal{L}', (S_{\alpha'}, s) \mathcal{S}' \right\rangle \\ & \times \sum_{\mathcal{J}, \mathcal{J}', j_i, j_f} (-1)^{2\mathcal{J} + j_i + j_f} [\mathcal{J}, \mathcal{J}'] T_{\mathcal{L}\mathcal{S}, J_{\alpha} j_i} T_{\mathcal{L}\mathcal{S}, J_{\beta} j_f} T_{\mathcal{L}'\mathcal{S}', J_{\alpha'} j_i} T_{\mathcal{L}'\mathcal{S}', J_{\beta'} j_f} \\ & \begin{Bmatrix} \mathcal{J}' & \mathcal{J} & a \\ J_{\beta} & J_{\beta'} & j_f \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathcal{J}' & \mathcal{J} & a \\ J_{\alpha} & J_{\alpha'} & j_i \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Les variables nommées $signe_\alpha(M_i)$, $signe_\beta(M_f)$ sont incluses pour accorder la phase des coefficients de mélange $a_{\alpha(-M_i)}$ et $a_{\beta(-M_f)}$ avec leurs correspondants $a_\alpha(M_i)$ et $a_\beta(M_f)$ comme cela a été indiqué au paragraphe 3.3. :

$$a_\alpha(-M_i) = a_\alpha(M_i) \times signe_\alpha(-M_i) \quad (5.8)$$

Notons toutefois que la notion de force de collision partielle n'est pas évidente. Elle ne correspond pas à une transition entre deux états bien spécifiés comme cela pouvait être le cas dans la formule 5.2 (états i et β) mais à un élément de matrice entre le "produit" de deux états $\alpha\alpha'$ et $\beta\beta'$.

Pour évaluer la structure d'un ion perturbé par le champ électrique, nous déterminons l'ensemble des états non perturbés qui y participent. Ces ensembles forment des sous-groupes stables. Nous pouvons par exemple citer le sous-groupe de $n=4$, $M=3/2$: $J=3/2^-$, $J=3/2^+$, $J=5/2^-$, $J=5/2^+$ et $J=7/2$ de l'Aluminium hydrogénoïde ou encore celui de $n=4$, $S=1$ $M=3$: 3F_4 , 3F_3 et 3D_3 de l'Aluminium héliumoïde. Nous présentons dans les Appendices A, B l'ensemble de ces sous-groupes. Ainsi, il n'est nécessaire d'évaluer que les forces de collisions partielles dont α et α' appartiennent au même sous-groupe et dont β et β' réalisent la même condition. Le calcul de l'ensemble de ces forces de collision partielles permet de déterminer ensuite la totalité des forces de collision. Nous supposons ici, comme dans le cas des transitions de couche K, que la modification des énergies de seuil des excitations par le champ électrique n'a quasiment pas d'influence sur les forces de collision et à plus forte raison sur les taux collisionnels. Par conséquent, la totalité des forces de collision partielles ont été calculées avec un champ électrique nul, l'énergie des niveaux étant prise comme la moyenne de celle de tous les niveaux non-perturbés du sous-groupe.

Nous évaluons ces forces de collision partielles en utilisant la même méthode de convergence que celle que nous avons développée pour la force de collision totale 4.66. Il faut cependant noter que la valeur maximum de l , moment angulaire des électrons libres, doit être au moins égale à 45 pour pouvoir traiter l'ensemble des transitions à haute énergie. En particulier, les transitions autorisées entre les couches $n=3$ et $n=4$ convergent très lentement et imposent cette valeur très élevée du moment angulaire.

Les éléments de matrice angulaires étant de très loin les plus longs à calculer, nous avons choisi d'évaluer préalablement les éléments de matrice radiaux à toutes les énergies désirées avant d'effectuer le produit de l'élément de matrice angulaire avec tous ces éléments radiaux. L'échantillonnage en énergie est celui présenté au paragraphe 4.7.2 avec 10 valeurs pour les hydrogénoïdes et 7 pour les héliumoïdes en raison des limites de mémoire de l'ordinateur. Cette méthode a permis de réduire les temps de calcul d'un facteur 10 pour les hydrogénoïdes et de 7 pour les héliumoïdes.

Avant de pouvoir calculer les forces de collision totales, nous avons donc dû calculer et enregistrer sur un fichier l'ensemble de ces forces de collision partielles. Pour calculer les forces de collision totales, il ne suffit plus que d'effectuer la lecture du fichier et de déterminer la structure des ions initial et final de la transition, sous champ électrique. Nos fichiers contiennent ainsi 103950 forces de collision partielles pour les hydrogénoïdes et 445137 pour les héliumoides.

5.5.2 Taux radiatifs

Les transitions dipolaires électriques sont les transitions radiatives les plus intenses et nous avons choisi de nous limiter à celles-ci. Le taux radiatif entre deux niveaux $\gamma_i M_i$ d'énergie E_i et $\gamma_f M_f$ d'énergie E_f inférieure s'écrit en unités atomiques (Cowan [19]) :

$$a_{if} = \frac{\alpha^3 (E_i - E_f)^3}{6} \sum_{q=0,\pm 1} | \langle \gamma_i M_i | P_q^{(1)} | \gamma_f M_f \rangle |^2 \quad (5.9)$$

où α est la constante de structure fine, les énergies sont exprimées en Rydbergs et l'opérateur $P_q^{(1)} = \sum_{i=1}^N r_i C_q^{(1)}(i)$. La probabilité de transition radiative par **seconde** entre les niveaux $\gamma_i \pm M_i$ et $\gamma_f \pm M_f$ s'écrit alors :

$$A_{if}(s^{-1}) = \frac{2.677 \cdot 10^9 (E_i - E_f)^3}{g_i} \sum_{q=0,\pm 1} \sum_{\pm M_i} \sum_{\pm M_f} | \langle \gamma_i M_i | P_q^{(1)} | \gamma_f M_f \rangle |^2 \quad (5.10)$$

où g est le poids statistique du niveau initial, à savoir : 1 si $M_i = 0$, 2 sinon. Ces mêmes poids statistiques sont utilisés pour le calcul des taux collisionnels (formules 4.82, 4.83).

Le calcul de l'élément de matrice $\langle \gamma_i M_i | P_q^{(1)} | \gamma_f M_f \rangle$ est similaire à celui des éléments de matrice Stark au chapitre 3. Il faut préalablement développer les états $\gamma_i M_i$ et $\gamma_f M_f$ sur la base des états non perturbés par le microchamp électrique : $|\gamma_i M_i\rangle = \sum \alpha |\gamma_\alpha L_\alpha S_\alpha J_\alpha M_i\rangle$ et $|\gamma_f M_f\rangle = \sum \beta |\gamma_\beta L_\beta S_\beta J_\beta M_f\rangle$ et les éléments de matrice élémentaires s'écrivent :

$$\langle \gamma L S J_\alpha M_i | P_q^{(1)} | \gamma L S J_\beta M_f \rangle = (-1)^{J_\alpha - M_i} \begin{pmatrix} J_\alpha & 1 & J_\beta \\ -M_i & 0 & M_f \end{pmatrix} \langle \gamma J_\alpha || \mathbf{P}^{(1)} || \gamma J_\beta \rangle \quad (5.11)$$

ce dernier élément se développant de façon semblable aux formules 3.3 et 3.4 :

$$\begin{aligned} & \langle \gamma L S J_\alpha || \mathbf{P}^{(1)} || \gamma L S J_\beta \rangle = \\ & \delta_{S_\alpha, S_\beta} (-1)^{L_\alpha + S_\alpha + J_\beta + 1} [J_\alpha, J_\beta]^{1/2} \begin{Bmatrix} L_\alpha & S_\alpha & J_\alpha \\ J_\beta & 1 & L_\beta \end{Bmatrix} \langle \gamma L S_\alpha || \mathbf{P}^{(1)} || \gamma L S_\beta \rangle \end{aligned} \quad (5.12)$$

et l'élément de matrice réduit rémanent est détaillé dans l'Appendice E.

5.5.3 Emissivité et populations

L'émissivité d'une raie $i \rightarrow g$ s'écrit :

$$j_\nu = \frac{E_{ig}}{4\pi} A_{ig} N_i f(E_{ig} - h\nu) \quad (5.13)$$

où E_{ig} est l'énergie de la transition, A_{ig} est le taux de transition radiative du niveau i vers le fondamental g , N_i est la population du niveau i et $f(E_{ig} - h\nu)$ est une fonction caractérisant l'élargissement. L'émissivité totale sur la distribution $P(\mathcal{E})$ de microchamp s'écrit :

$$j_\nu = \int \frac{E_{ig}(\mathcal{E})}{4\pi} A_{ig}(\mathcal{E}) N_i(\mathcal{E}) f(E_{ig}(\mathcal{E}) - h\nu) P(\mathcal{E}) d\mathcal{E} \quad (5.14)$$

Les populations $N_i(\mathcal{E})$ sont déterminées en supposant l'état stationnaire $\frac{dN_i}{dt} = 0$ et en diagonalisant la matrice des taux. Dans la mesure où aucun processus d'ionisation n'est considéré et où la température du milieu que nous choisissons ($T_e = T_i = 500\text{eV}$ ici, soit 36.76 Ryd) est assez inférieure aux énergies d'excitation à partir du fondamental, d'après la loi statistique de Maxwell-Boltzmann, la population de ce niveau reste peu perturbée par les processus de peuplement vers les niveaux excités. Nous choisirons donc le niveau fondamental comme niveau de référence pour les populations : $N_0(\mathcal{E}) = P(\mathcal{E})$, la distribution de microchamp étant normalisée.

Pour calculer les populations des niveaux excités, en fonction du champ électrique, deux logiques sont possibles :

- Calculer les taux collisionnels et radiatifs moyennés en fonction de la distribution de microchamp, puis en diagonalisant ces taux moyennés, obtenir une population moyenne de l'état \bar{N} ; la population utilisée pour calculer le profil de raie précédent 5.14 valant : $N(\mathcal{E}) = \bar{N}.P(\mathcal{E})$. Il n'y a alors qu'une seule diagonalisation.
- Calculer la population de chaque niveau, pour chaque champ électrique, en diagonalisant la matrice des taux pour chaque valeur du champ.

La première approche suppose que le microchamp, quasi-statique à l'échelle des processus collisionnels ou radiatifs, varie rapidement entre deux transitions subies par l'ion. Par conséquent, la mémoire du champ électrique de la population est perdue et elle s'accorde avec la distribution de microchamp.

La seconde approche considère que les variations du champ électrique entre la transition qui peuple un niveau et celle qui le dépeuple restent négligeables. Il n'y a donc pas de transfert de populations entre des champs électriques distincts, mais seulement entre les différents niveaux, en conservant la même valeur de champ électrique.

Il suffit donc de comparer les temps caractéristiques de modification du microchamp à ceux séparant deux transitions. En première approximation, on peut assimiler le temps de variation du microchamp au temps nécessité par un ion perturbateur pour traverser la sphère ionique de l'ion perturbé : $\tau_{\mathcal{E}} = \frac{r_{ws}}{v_i} = \left(\frac{3Z^*}{4\pi N_e} \right)^{1/3} \left(\frac{m_i}{3kT_i} \right)^{1/2}$, temps caractéristique déjà mentionné au premier chapitre (formule 1.28). On obtient alors $\tau_{\mathcal{E}}(s) = \frac{1.68 \cdot 10^{-7}}{N_e^{1/3} (cm^{-3})}$ pour $T_e = T_i = 500 eV = 36.76 Ryd$, valeur de la température que nous avons choisie pour le calcul des spectres. Les taux radiatifs les plus forts sont de l'ordre de $10^{13} s^{-1}$ pour les transitions de la couche $n=2$ vers le fondamental, plus faibles sinon ; les taux collisionnels sont inférieurs systématiquement à $10^{-8} \times N_e (cm^3 s^{-1})$. Les temps caractéristiques séparant deux transitions sont l'inverse de ces taux.

Ainsi, pour $10^{19} \leq N_e \leq 10^{24} e^{-}/cm^3$, le temps caractéristique de variation du microchamp est systématiquement inférieur à celui séparant deux transitions. Il est donc plus pertinent de supposer que le microchamp moyenne les taux de transition et donc les populations.

Dans ces conditions, les taux collisionnels se récrivent simplement à partir de la formule 4.82 :

$$\begin{aligned} \int \langle \sigma v \rangle (\mathcal{E}) P(\mathcal{E}) d\mathcal{E} &= \frac{2.17 \cdot 10^{-8}}{gT_{Ryd}^{1/2}} \int P(\mathcal{E}) d\mathcal{E} \int_{E_{seuil}(\mathcal{E})}^{\infty} \Omega(E, \mathcal{E}) e^{-E/T} dE/T \\ &\approx \frac{8.63 \cdot 10^{-6}}{gT_K^{1/2}} \int_{E_{seuil}}^{\infty} \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \Omega_{\alpha\beta\alpha'\beta'}(E) \left(\int \alpha\beta\alpha'\beta' P(\mathcal{E}) d\mathcal{E} \right) e^{-E/T} dE/T \end{aligned} \quad (5.15)$$

soit,

$$\begin{aligned} \int \langle \sigma v \rangle (\mathcal{E}) P(\mathcal{E}) d\mathcal{E} &\approx \\ \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \left(\int \alpha\beta\alpha'\beta' P(\mathcal{E}) d\mathcal{E} \right) &\frac{8.63 \cdot 10^{-6}}{gT_K^{1/2}} \int_{E_{seuil}}^{\infty} \Omega_{\alpha\beta\alpha'\beta'}(E) e^{-E/T} dE/T. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Le taux collisionnel est une simple somme de taux collisionnels partiels et l'on peut choisir approximativement l'énergie du seuil de réaction comme la moyenne sur le microchamp des énergies de seuil dépendantes du champ :

$$E_{seuil} \approx \int E_{seuil}(\mathcal{E}) P(\mathcal{E}) d\mathcal{E} \quad (5.17)$$

5.5.4 Elargissement collisionnel électronique

La fonction d'élargissement f des formules 5.13 et 5.14 comprend l'ensemble des phénomènes d'amortissement, mais qui sont composés largement d'amortissement

par impact collisionnel avec les électrons dans les plasmas denses et chauds ainsi que dans une moindre mesure de l'élargissement Doppler lorsque les densités sont peu élevées. Nous nous restreindrons donc à ces deux-ci. La fonction f adopte un profil Lorentzien :

$$f(E_{ig}(\mathcal{E}) - h\nu) = \frac{C}{(h\nu - E_{ig})^2 + \Delta\nu^2} \quad (5.18)$$

où $\Delta\nu$ est la largeur de raie. Nous avons choisi de prendre la plus grande des largeurs électronique $\Delta\nu_E$ et Doppler $\Delta\nu_D$. $\Delta\nu_E$ à pour ordre de grandeur (Alaterre [4]) :

$$\Delta\nu_E(Ryd) \approx 2.6 \cdot 10^{-23} \frac{n^4}{Z^2} \frac{N_e(cm^{-3})}{T_e(Ryd)} \quad (5.19)$$

et la largeur Doppler vaut :

$$\Delta\nu_D(Ryd) = 1.2 \cdot 10^{-4} \sqrt{Z^3 T_e(Ryd)}. \quad (5.20)$$

Notons que la formule utilisée pour évaluer l'amortissement collisionnel électronique repose sur des simplifications massives et suppose en particulier que l'élargissement est du aux collisions faibles (i.e. distantes), ce qui est d'autant moins vérifié que la densité s'accroît. Les élargissements seront donc fortement surévalués à forte densité. Cette approche permet néanmoins d'échapper à un traitement, certes plus précis, mais beaucoup plus lourd [4, 31].

5.5.5 Aluminium hydrogénoïde

Nous traçons dans les figures 5.15 à 5.22 les profils obtenus pour les raies Ly α , β , γ de l'Aluminium à $T_e = T_i = 500eV$ pour des densités électroniques variant entre 10^{20} et $10^{23} e/cm^3$. Nous présentons simultanément les résultats obtenus pour des taux collisionnels dépendant du champ électrique $\langle \sigma v \rangle (\mathcal{E})$ et des taux indépendants $\langle \sigma v \rangle = cte$ ainsi que le spectre émis par un milieu à l'Equilibre Thermodynamique Local. Les émissivités sont données dans les graphiques en unités arbitraires et nous avons choisi de les superposer, masquant ainsi les éventuelles différences de hauteur entre les raies (très faibles néanmoins).

Comme nous allons le voir, les différences entre les profils apparaissent à relativement faible densité, c'est à dire, en général, Hors Equilibre Thermodynamique Local, à proximité de l'Equilibre Coronal. Nous avons donc choisi de présenter, parallèlement aux spectres, les taux collisionnels qui peuplent les niveaux à partir du fondamental, en nous restreignant aux niveaux décroissant radiativement vers le fondamental (figures 5.7 à 5.11). Dans le cas des hydrogénoïdes, les règles de sélection imposées par les transitions dipolaires électriques sont peu contraignantes et n'excluent que les niveaux dont $|M| > 3/2$ ($\Delta M = 0, \pm 1$), tous les autres niveaux excités se mélangent avec $^2P_{3/2}$ et $^2P_{1/2}$ en présence de champ électrique.

- La raie Lyman α (figures 5.15 et 5.16) montre que le milieu est à l'ETL dès $N_e = 10^{22} e - /cm^3$. Les profils sont quasiment indépendants des modifications des taux collisionnels par le champ électrique, hormis à $N_e = 10^{22} e - /cm^3$ où la raie $^2P_{1/2}$ est 6% plus faible lorsque les taux collisionnels sont indépendants du champ. L'absence de modifications plus marquées s'explique par la très faible variation des taux collisionnels en fonction de la densité (figure 5.7). Nous notons aussi que les ailes lointaines de raies, à cette densité, sont plus étroites d'environ 3%. Cet effet a été anticipé en conclusion du paragraphe 4.5.5 lors de la comparaison entre les différents modèles sur du Néon hydrogéoïde, il est dû à une redistribution des populations vers les états les plus modifiés en énergie.
- La raie Lyman β (figures 5.17, 5.18 et 5.19) est en quasi-ETL dès $N_e = 3.2 \cdot 10^{19} e - /cm^3$. La raie dont les taux collisionnels dépendent du champ électrique s'élargit légèrement à partir de $10^{19} e - /cm^3$ par rapport à celle dont les taux sont fixes, la différence étant maximale entre $N_e = 3.2 \cdot 10^{20} e - /cm^3$ et $10^{21} e - /cm^3$, de l'ordre de 4% à mi-hauteur. Mais il est important de noter que cet élargissement s'effectue essentiellement vers les énergies les plus élevées et que l'ensemble de la raie se déplace vers ces énergies par rapport à la raie dont les taux collisionnels ne sont pas perturbés. Les transitions de $1s$ vers $n=3$ $^2D_{5/2}$, $|M| = 1/2$ ou $3/2$ initialement 6.7 fois inférieures à celles vers $J = 3/2 \pm$ et 10 fois plus faibles que celles vers $J = 1/2 \pm$ deviennent supérieures aux premières entre 10^{20} et $10^{21} e - /cm^3$ et de l'ordre des secondes vers $10^{21} e - /cm^3$ (figures 5.8 et 5.9). Les ions dans l'état initial $^2D_{5/2}$ dont l'énergie augmente lorsque le champ croît voient leur population devenir significative et engendrent un élargissement de la raie vers les plus hautes énergies.
- La raie Lyman γ présente un comportement similaire à Lyman β , néanmoins plus marqué et pour des densités légèrement plus faibles (figures 5.20, 5.21 et 5.22). L'élargissement à mi-hauteur est au maximum de l'ordre de 6% entre $3.2 \cdot 10^{19}$ et $10^{20} e - /cm^3$ et il s'effectue au profit des énergies les plus élevées. Les niveaux responsables de cet élargissement sont $J = 5/2 \pm$, $|M| = 1/2$ ou $3/2$ et surtout $^2F_{7/2}$, $|M| = 1/2$ et $3/2$ (figures 5.10 et 5.11).

5.5.6 Aluminium héliumoïde

Nous présentons dans les figures 5.23 à 5.27 les mêmes profils qu'au paragraphe précédent. Les raies Hélium α (figures 5.23 et 5.24) et Hélium β (figures 5.25, 5.26 et 5.27) ne présentent aucune modification apparente entre un calcul collisionnel

dépendant du champ électrique et un calcul qui en est indépendant. Les raies Hélium γ présentent, elles, des différences modestes, mais qui changent avec la densité (figures 5.22, 5.22et 5.22). Ainsi, entre $N_e = 10^{20} e - /cm^3$ et $3.210^{20} e - /cm^3$ l'ensemble de la raie dont les taux collisionnels sont fonction du microchamp est décalée vers les énergies plus basses en regard de celle dont les taux sont indépendants du champ (de $1.5 \cdot 10^{-3} Ryd$), tandis qu'à $10^{21} e - /cm^3$, un rétrécissement (de 4%) de la raie, dont les taux collisionnels sont fonction du champ, s'effectue exclusivement aux énergies les plus élevées.

Pour interpréter ces résultats nous présentons les taux collisionnels des transitions depuis le fondamental. Les règles de sélection des transitions dipolaires électriques sont plus contraignantes pour les héliumoides et réduisent le nombre de taux à étudier :

- $\Delta S = 0$
- $\Delta L = 0, \pm 1$, $L_i = L_f = 0$ étant interdit
- $\Delta J = 0, \pm 1$, $J_i = J_f = 0$ étant interdit
- $\Delta M = 0, \pm 1$.

Le niveau fondamental étant 1S_0 , seuls les niveaux mélangés avec l'état 1P_1 par le champ électrique seront présentés.

Pour la raie Hélium α , les taux collisionnels sont indépendants du champ (figure 5.12) et les profils ne se distinguent pas.

Les taux collisionnels de la raie Hélium β (figure 5.13) varient plus notablement, en particulier pour la transition vers le niveau issu de 1D_2 , $|M| = 1$. Néanmoins, ces taux ne deviennent significatifs qu'à "haute densité", au delà de $10^{22} e - /cm^3$, lorsque le milieu est totalement à l'ETL.

Le profil de la raie Hélium γ est régi par les taux collisionnels les plus forts (figure 5.14) qui sont, aux densités que nous avons déjà mentionnées, $^1P_1 |M| = 0, 1$, $^1F_3 |M| = 1$, $^1D_2 |M| = 1$. Nous oublions volontairement 1S_0 dont l'énergie est beaucoup plus faible et qui n'interagit pas avec la raie centrale aux densités inférieures à $N_e = 3.210^{21} e - /cm^3$. Les énergies de ces états se répartissent selon : $E_{1P_1} > E_{1F_3} > E_{1D_2}$, par conséquent, l'énergie des niveaux $^1P_1 |M| = 0, 1$ croît avec le champ électrique et la densité, celle de $^1F_3 |M| = 1$ reste quasi-stable et celle de $^1D_2 |M| = 1$ décroît. Comme les taux collisionnels de 1P_1 décroissent et ceux de $^1D_2 |M| = 1$ augmentent, les populations d'énergie la plus élevée se réduisent, à l'inverse de celles d'énergie la plus faible. A $10^{21} e - /cm^3$, la décroissance forte des niveaux 1P_1 d'énergie la plus élevée est essentiellement compensée par l'augmentation des taux collisionnels de $^1F_3 |M| = 1$, d'énergie stable en dépit de la variation de densité. La modification de profil se fait donc essentiellement par une réduction des populations d'énergies les plus élevées.

5.6 Conclusion

Nous avons déterminé dans ce chapitre quelques formules simples qui permettent d'évaluer les taux collisionnels en fonction de la densité, de façon rapide, sans avoir à calculer de forces de collision directement pour chaque valeur du champ électrique. Pour limiter les temps de calcul, nous avons choisi de ne pas mélanger de niveaux de couches différentes. En conséquence, il n'y a pas de modification des taux globaux entre deux couches.

Les modifications des taux collisionnels s'effectuent pour des densités d'autant plus faibles que les niveaux qui se mélangent ont des énergies proches, ce qui explique que les transitions vers des couches de n élevé ont des taux collisionnels modifiés pour des densités très faibles.

Les transitions initialement interdites et que le champ rend partiellement autorisées par mélange des différents niveaux ont leurs taux collisionnels très fortement majorés, parfois de plusieurs ordres de grandeur. A l'inverse, les transitions autorisées à champ nul dont les niveaux se mélangent avec le champ voient généralement leurs taux collisionnels être minorés. Globalement, le champ électrique a tendance à rapprocher les différents taux collisionnels.

Nous avons réalisé un code Collisionnel Radiatif simple, intégrant les excitations et désexcitations collisionnelles modifiées par le microchamp ainsi que les transitions radiatives dipolaires électriques. En supposant le milieu en équilibre stationnaire, les raies Ly α , He α et He β restent inchangées lorsque les taux collisionnels dépendent du champ électrique, tandis que les raies Ly β et surtout Ly γ s'élargissent légèrement vers $N_e = 10^{20} - 10^{21} \text{ e-}/\text{cm}^3$, se décalant vers les énergies plus élevées. La raie He γ se resserre, elle, faiblement, pour les mêmes densités, se décalant vers les énergies plus réduites.

Néanmoins, ces modifications restent très faibles, quelques pourcent tout au plus et à des densités moyennes. A plus haute densité, l'Equilibre Thermodynamique Local est systématiquement atteint.

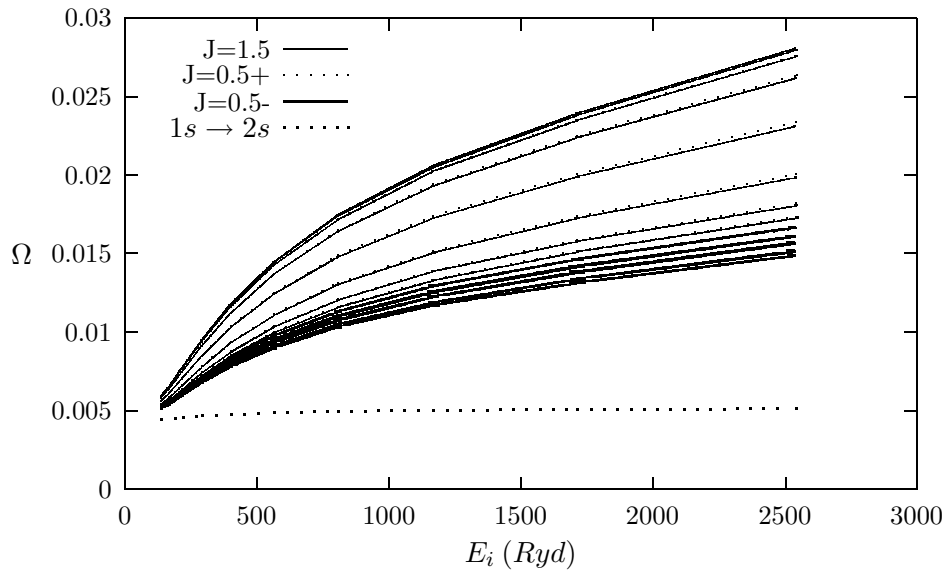


FIG. 5.1 – Forces de collision pour les transitions entre $1s^2S_{1/2}$ et les états issus de $2s$ et $2p$ $J=1/2-$, $J=1/2+$ et $J=3/2$, $|M| = 1/2$, en fonction de l'énergie. Les différentes courbes correspondent à différentes valeurs du champ électrique : 0, 0.02, 0.04, 0.08, 0.16, 0.32, 0.64 et 1.28 u.a. Les courbes $1s-J=1/2+$ (pointillé) et $1s-J=1/2-$ (trait continu épais) se superposent à champ électrique nul. L'amplitude générale des courbes $1s-J=1/2+$ croît lorsque le champ augmente (jusqu'à être comparable à celle d'une transition $1s-2p$) tandis que celle des courbes $1s-J=1/2-$ décroît très légèrement jusqu'à 0.16 u.a. puis revient vers sa valeur initiale. L'amplitude générale des courbes $1s-J=3/2$ (en trait continu fin) décroît inversement de $1s-J=1/2+$ lorsque le champ augmente et se stabilise vers 1 u.a. (Al hydrogénoïde)

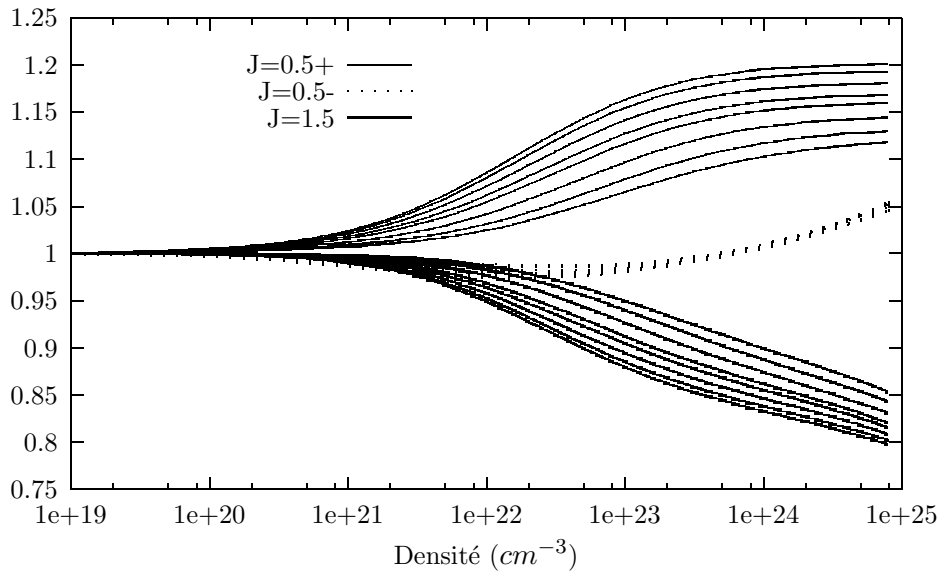


FIG. 5.2 – Coefficients de variation des taux collisionnels pour les transitions entre les couches $n=1$ et $n=2$ ($|M| = 0.5$) en fonction de la densité électronique ($1s-J=1/2+$ en trait continu fin, $1s-J=1/2-$ en pointillés et $1s-J=3/2$ en trait épais). Les différentes courbes correspondent à différentes valeurs de la température ($T_e = T_i$) : 97.5, 134.8, 209.2, 321., 395.5, 507.2, 618.9 et 693.4 eV. (Al hydrogénoïde)

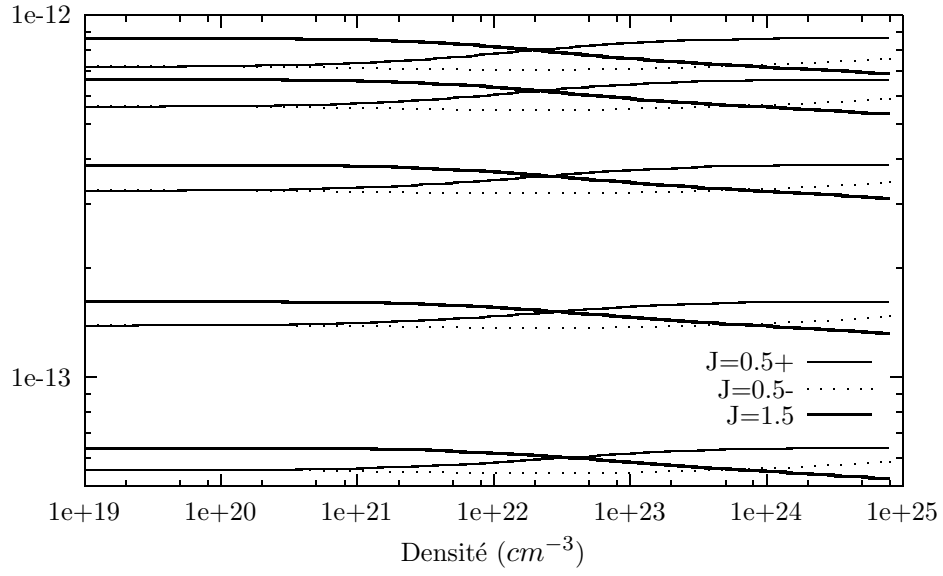


FIG. 5.3 – Taux collisionnels pour les transitions entre les couches $n=1$ et $n=2$ ($|M| = 0.5$) en fonction de la densité électronique ($1s-J=1/2+$ en trait fin, $1s-J=1/2-$ en pointillé et $1s-J=3/2$ en trait épais). Les différentes courbes correspondent à différentes valeurs de la température ($T_e = T_i$) : de bas en haut 321., 395.5, 507.2, 618.9 et 697.4 eV. (Al hydrogénoïde)

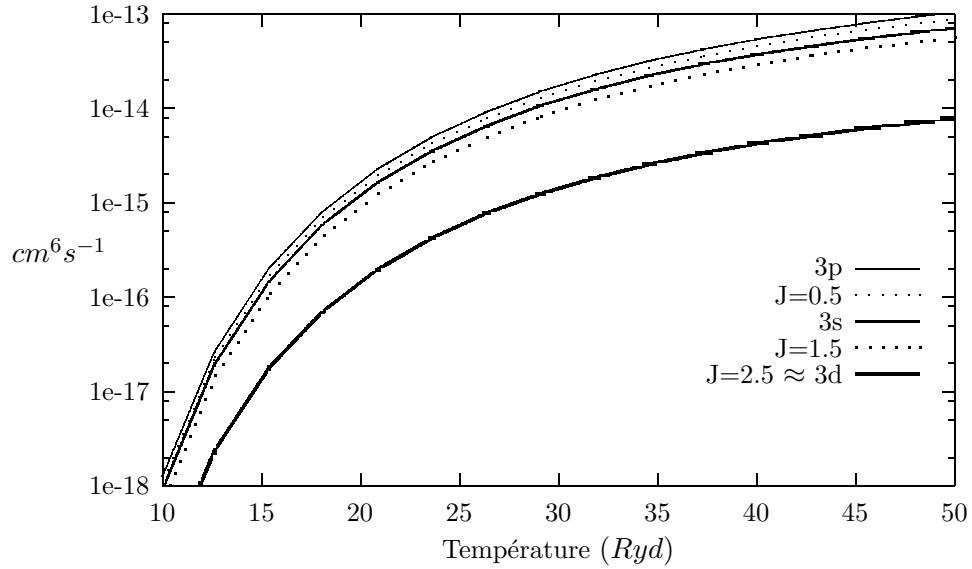


FIG. 5.4 – Taux collisionnels pour les transitions entre les couches $n=1$ et $n=3$ ($|M| = 0.5$) en l'absence de champ électrique en fonction de la température $T_e = T_i$. La transition $1s-J=1/2$ est en pointillé fin, $1s-J=3/2$ en pointillé épais et $1s-J=5/2$ en trait continu très épais ($1s-J=1/2+$ et $1s-J=1/2-$ sont confondus ainsi que $1s-J=3/2+$ et $1s-J=3/2-$). Les courbes $1s-3s$ en trait continu fin et $1s-3p$ en trait continu épais sont présentées pour comparaison. (Al hydrogénoïde)

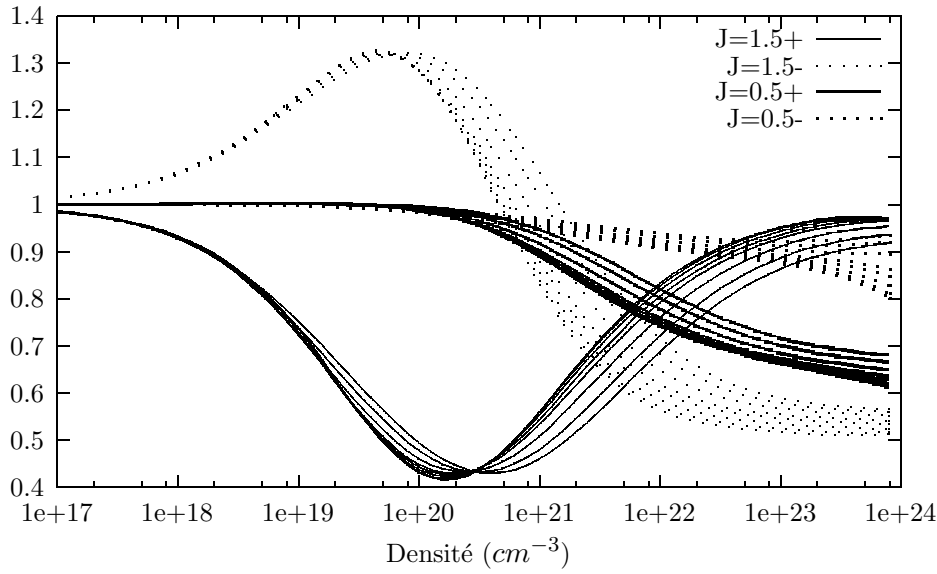


FIG. 5.5 – Variation des taux collisionnels pour les transitions entre les couches $n=1$ et $n=3$ ($|M| = 1/2$) (sauf $1s - n=3$ $J=5/2$) en fonction de la densité électronique par rapport à leur valeur pour un ion isolé. La transition $1s-J=3/2+$ est en trait continu fin, $1s-J=3/2-$ en pointillé fin, $1s-J=1/2+$ en trait continu épais et $1s-J=1/2-$ en pointillé épais. Les différentes courbes correspondent à différentes valeurs de la température ($T_e = T_i$) : 97.5, 134.8, 209.2, 321., 395.5, 507.2, 618.9 et 697.4 eV : plus la température est élevée, plus la courbe varie pour des densités faibles. (**Al hydrogénoïde**)

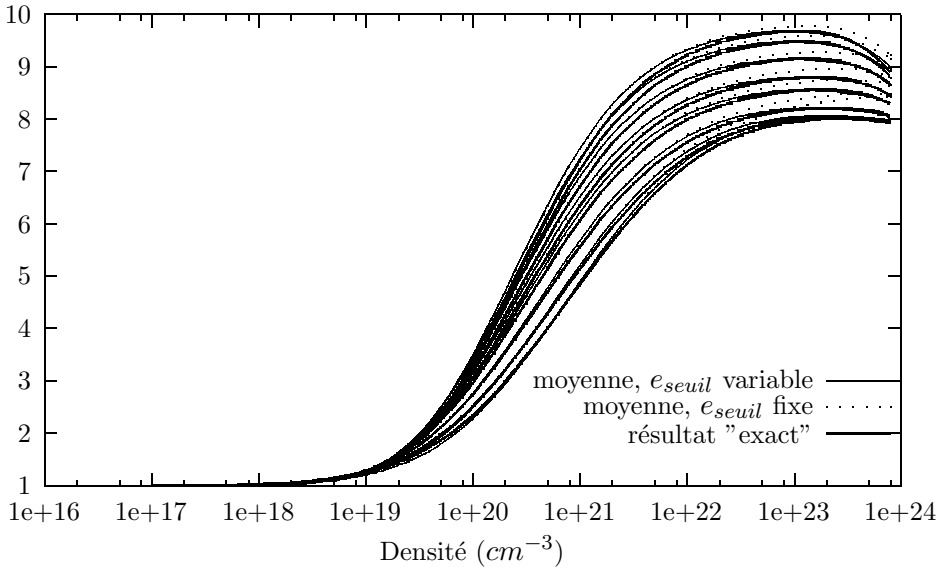


FIG. 5.6 – Même légende pour les transitions entre les couches $n=1$ et $n=3$ $J=5/2$ ($|M| = 1/2$). La courbe en trait épais correspond à un calcul exact mélangeant les couches $n=3$ et $n=4$ avec le champ électrique. Les autres courbes ne mélangent que des états de la couche $n=3$. La courbe en trait fin correspond à une moyenne sur le champ où chaque énergie de seuil dépend du microchamp (formule 5.3). La courbe en pointillé suppose que l'énergie du seuil de la transition est indépendante du microchamp (formule 5.4). (**Al hydrogénoïde**)

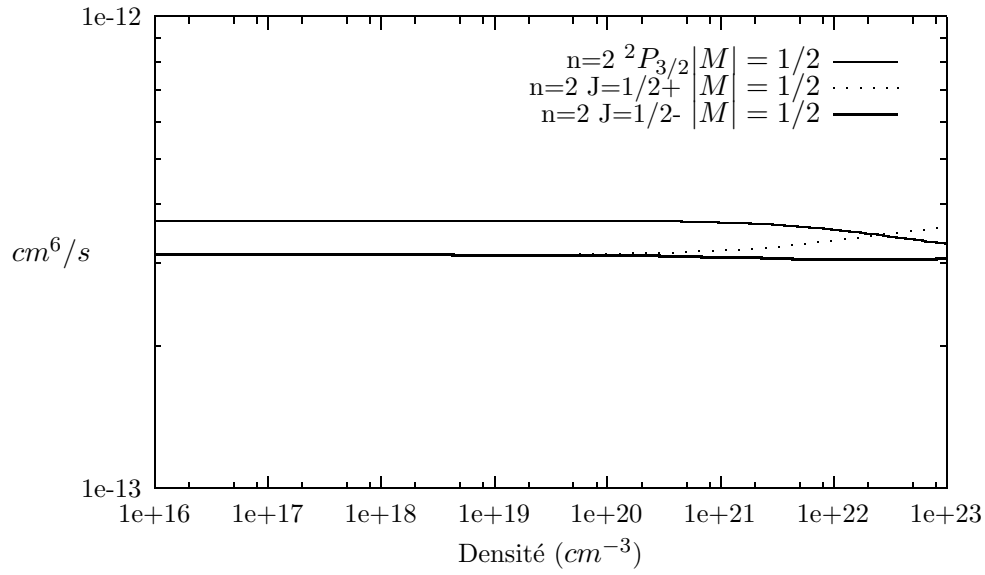


FIG. 5.7 – Taux collisionnels moyennés en champ électrique pour les transitions entre les couches **n=1 et n=2** ($|M| = 1/2$) en fonction de la densité électronique. $1s\text{-}^2P_{3/2}$ est en trait continu fin, $1s\text{-}J=1/2+$ en pointillé et $1s\text{-}J=1/2-$ en trait continu épais. (**Al hydrogénéoïde**)

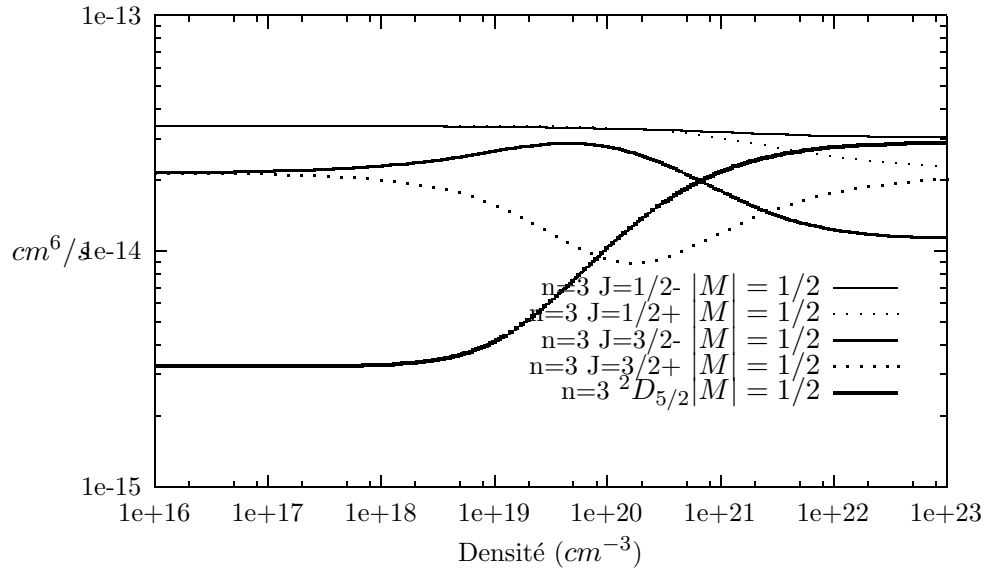


FIG. 5.8 – Taux collisionnels moyennés en champ électrique pour les transitions entre les couches **n=1 et n=3** ($|M| = 1/2$) en fonction de la densité électronique. $1s\text{-}J=1/2-$ est en trait continu fin, $1s\text{-}J=1/2+$ en pointillé fin, $1s\text{-}J=3/2-$ en trait continu épais, $1s\text{-}J=3/2+$ en pointillé épais et $1s\text{-}^2D_{5/2}$ en trait continu très épais. (**Al hydrogénéoïde**)

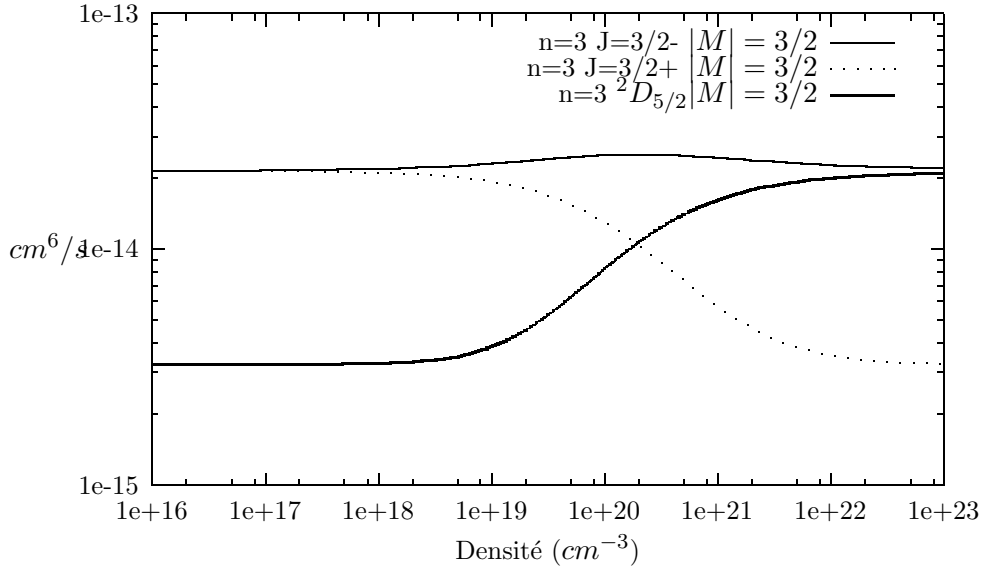


FIG. 5.9 – Taux collisionnels moyennés en champ électrique pour les transitions entre les couches **n=1 et n=3** ($|M| = 3/2$) en fonction de la densité électronique. 1s-J=3/2- est en trait continu fin, 1s-J=3/2+ en pointillé fin et 1s- $^2D_{5/2}$ en trait continu épais. (**Al hydrogéoïde**)

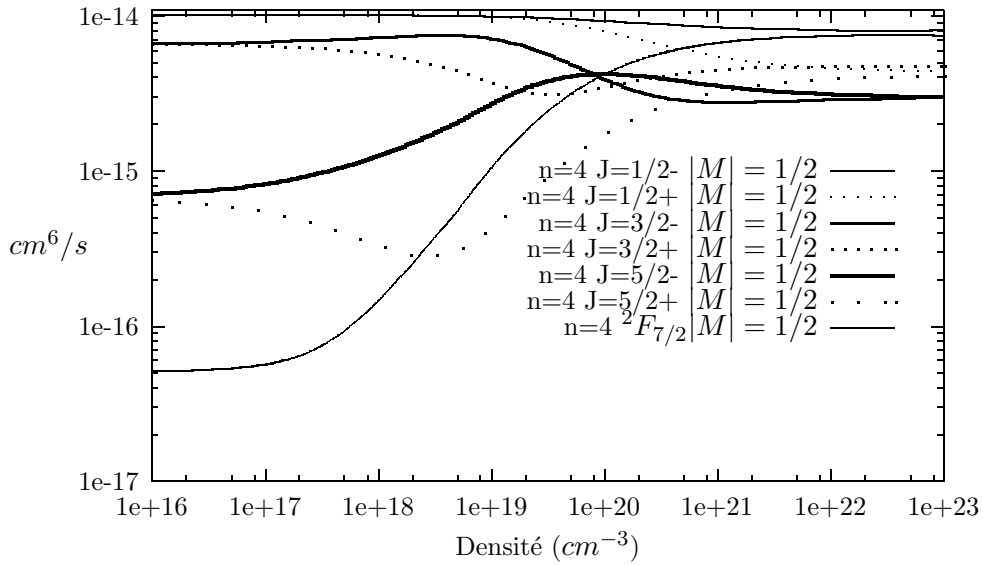


FIG. 5.10 – Taux collisionnels moyennés en champ électrique pour les transitions entre les couches **n=1 et n=4** ($|M| = 1/2$) en fonction de la densité électronique. 1s-J=1/2- est en trait continu fin, 1s-J=1/2+ en pointillé fin, 1s-J=3/2- en trait continu épais, 1s-J=3/2+ en pointillé épais, 1s-J=5/2- en trait continu très épais, 1s-J=5/2+ en pointillé épais espacé et 1s- $^2F_{7/2}$ en trait continu fin (valeur la plus faible à basse densité). (**Al hydrogéoïde**)

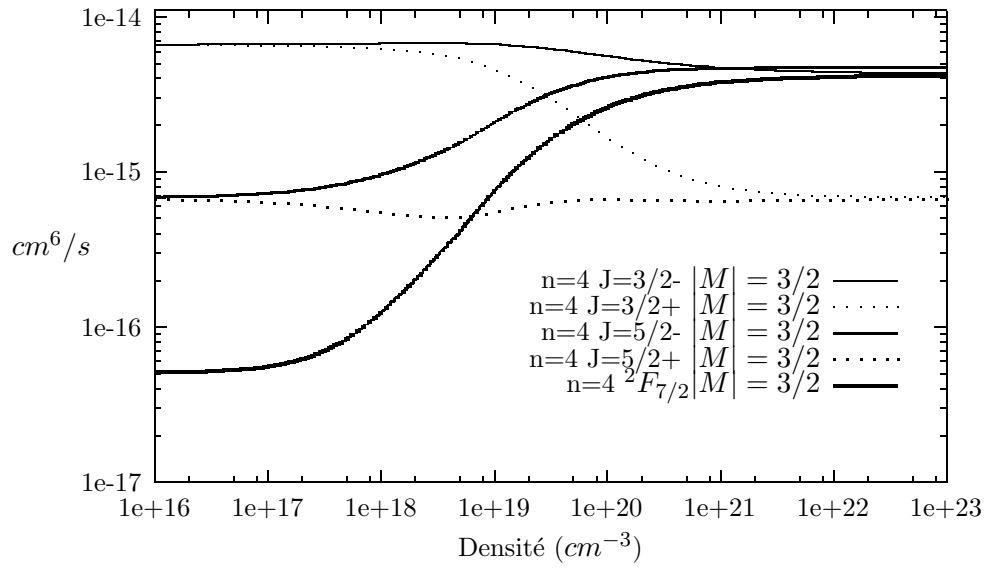


FIG. 5.11 – Taux collisionnels moyennés en champ électrique pour les transitions entre les couches **n=1 et n=4** ($|M| = 3/2$) en fonction de la densité électronique. $1s\text{-}J=3/2\text{-}$ est en trait continu fin, $1s\text{-}J=3/2\text{+}$ en pointillé fin, $1s\text{-}J=5/2\text{-}$ en trait continu épais, $1s\text{-}J=5/2\text{+}$ en pointillé épais et $1s\text{-}^2F_{7/2}$ en trait continu très épais. (**Al hydrogéoïde**)

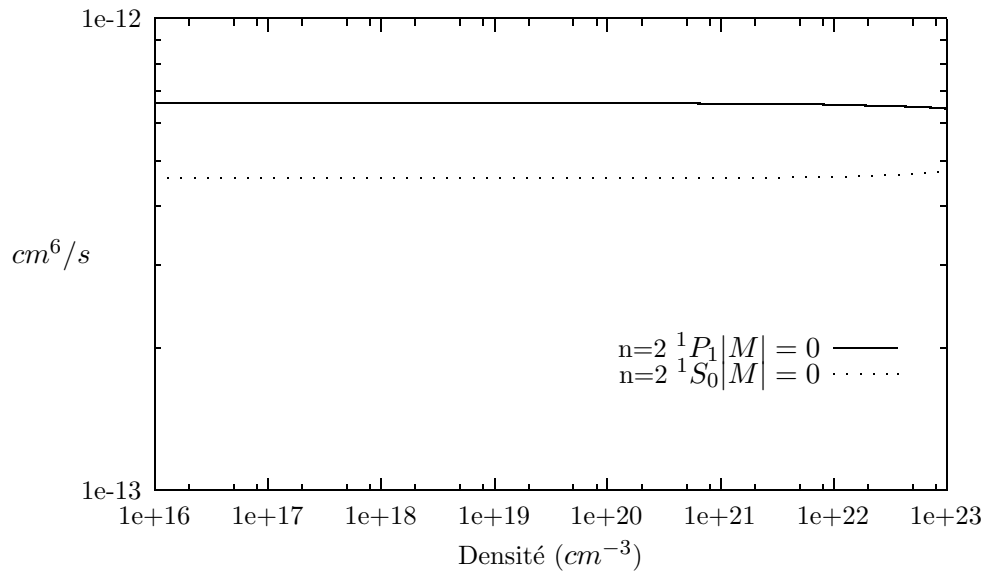


FIG. 5.12 – Taux collisionnels moyennés en champ électrique pour les transitions entre les couches **n=1 et n=2** en fonction de la densité électronique. $1s^2 - 1s2l^1P_1|M|=0$ est en trait continu fin et $1s^2 - 1s2l^1S_0|M|=0$ en pointillé fin. (**Al héliumoïde**)

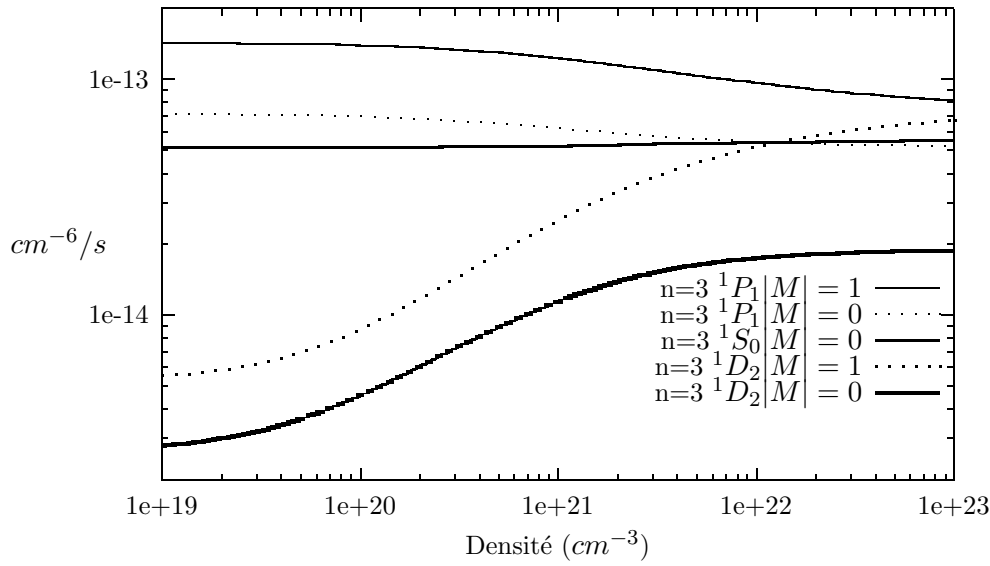


FIG. 5.13 – Taux collisionnels moyennés en champ électrique pour les transitions entre les couches **n=1** et **n=3** en fonction de la densité électronique. $1s^2 - 1s3l^1P_1|M| = 1$ est en trait continu fin, $1s^2 - 1s3l^1P_1|M| = 0$ en pointillé fin, $1s^2 - 1s3l^1S_0|M| = 0$ est en trait continu épais, $1s^2 - 1s3l^1D_2|M| = 1$ en pointillé épais et $1s^2 - 1s3l^1D_2|M| = 0$ en trait continu très épais. (Al héliumoïde)

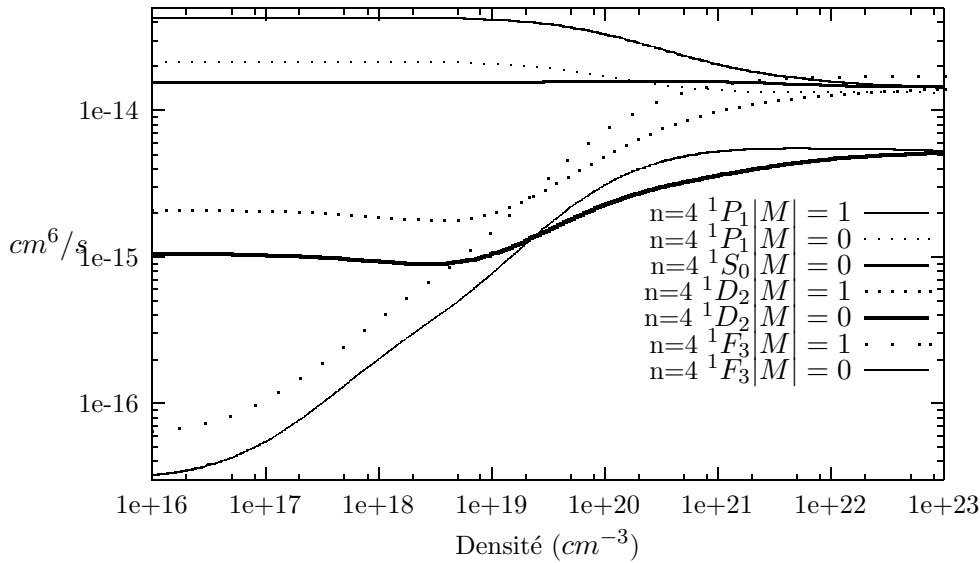


FIG. 5.14 – Taux collisionnels moyennés en champ électrique pour les transitions entre les couches **n=1** et **n=4** en fonction de la densité électronique. $1s^2 - 1s4l^1P_1|M| = 1$ est en trait continu fin, $1s^2 - 1s4l^1P_1|M| = 0$ en pointillé fin, $1s^2 - 1s4l^1S_0|M| = 0$ est en trait continu épais, $1s^2 - 1s4l^1D_2|M| = 1$ en pointillé épais, $1s^2 - 1s4l^1D_2|M| = 0$ en trait continu très épais, $1s^2 - 1s4l^1F_3|M| = 1$ en pointillé épais espacé et $1s^2 - 1s4l^1F_3|M| = 0$ en trait continu fin (valeur la plus faible à basse densité). (Al héliumoïde)

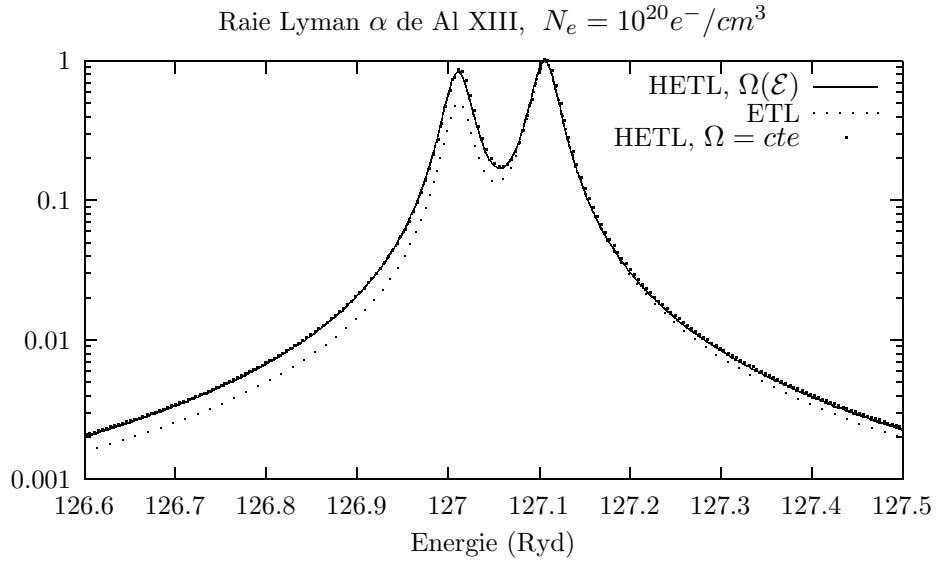


FIG. 5.15 – Profil de la raie Lyman α de l'**Aluminium hydrogénoïde** à la température $T_e = T_i = 36.76 Ryd = 500 eV$ et à la densité électronique $N_e = 10^{20} e^- / cm^3$, $Z^* = 12$. En trait continu fin, le profil collisionnel radiatif dont tous les taux sont calculés en fonction du champ électrique; en pointillé épais, le profil collisionnel radiatif dont les taux collisionnels sont indépendants du champ électrique, en pointillé fin, le profil obtenu en supposant le milieu en Equilibre Thermodynamique Local. Les émissivités sont en unités arbitraires et en échelle logarithmique.

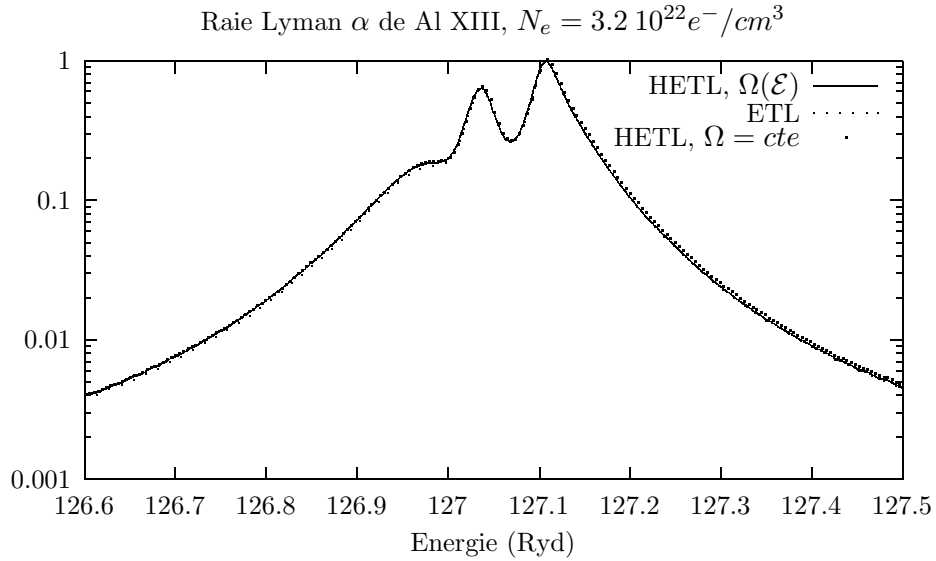


FIG. 5.16 – Même légende que pour la figure précédente, pour une densité électronique $N_e = 3.2 \cdot 10^{22} e^- / cm^3$.

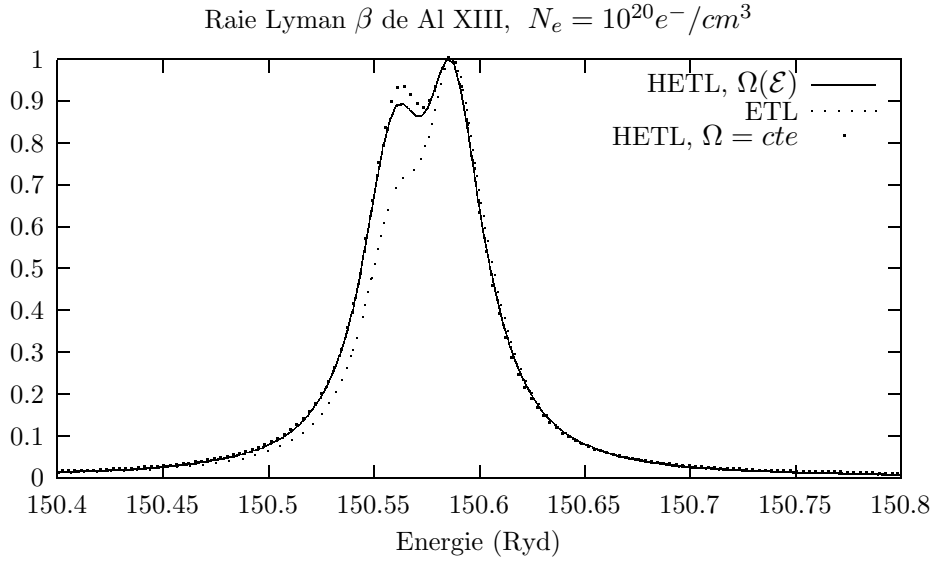


FIG. 5.17 – Profil de la raie Lyman β de l'**Aluminium hydrogénéoïde** à la température $T_e = T_i = 36.76 Ryd = 500 eV$ et à la densité électronique $N_e = 10^{20} e^- / cm^3$, $Z^* = 12$. En trait continu fin, le profil collisionnel radiatif dont tous les taux sont calculés en fonction du champ électrique ; en pointillé épais, le profil collisionnel radiatif dont les taux collisionnels sont indépendants du champ électrique, en pointillé fin, le profil obtenu en supposant le milieu en Equilibre Thermodynamique Local. Les émissivités sont en unités arbitraires.

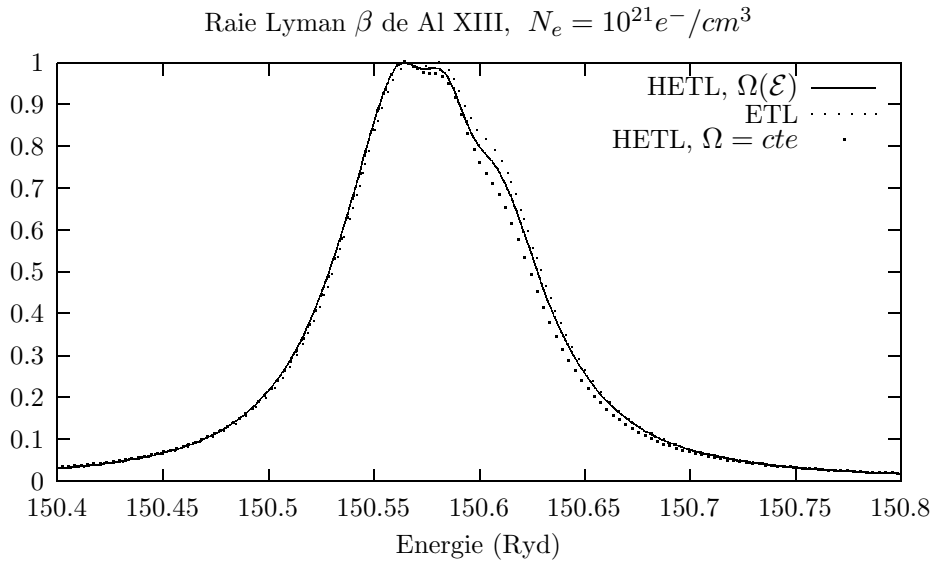


FIG. 5.18 – Même légende que pour la figure précédente, pour une densité électronique $N_e = 10^{21} e^- / cm^3$.

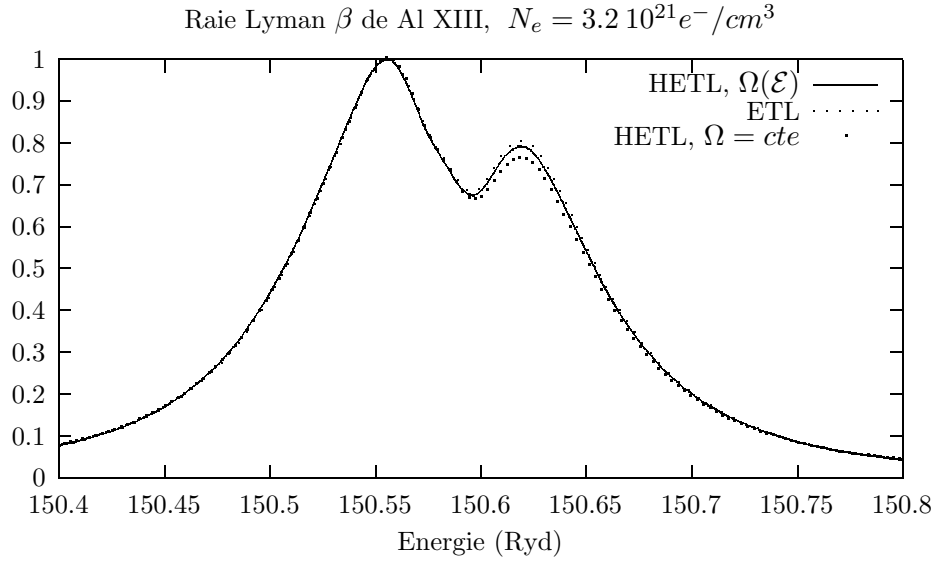


FIG. 5.19 – Même légende que pour la figure précédente, pour une densité électronique $N_e = 3.2 \cdot 10^{21} e^- / cm^3$.

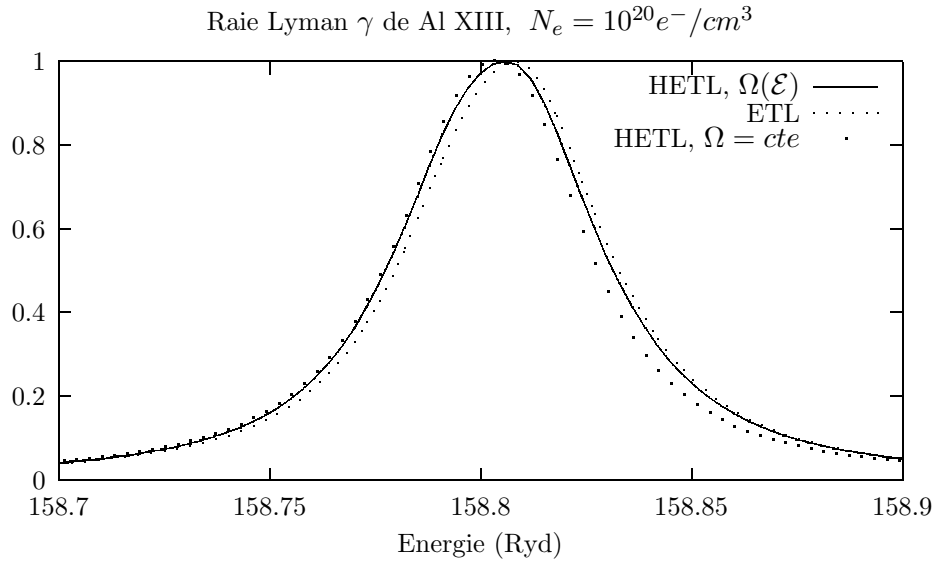


FIG. 5.20 – Profil de la raie Lyman γ de l'**Aluminium hydrogénéoïde** à la température $T_e = T_i = 36.76 Ryd = 500 eV$ et à la densité électronique $N_e = 10^{20} e^- / cm^3$, $Z^* = 12$. En trait continu fin, le profil collisionnel radiatif dont tous les taux sont calculés en fonction du champ électrique ; en pointillé épais, le profil collisionnel radiatif dont les taux collisionnels sont indépendants du champ électrique, en pointillé fin, le profil obtenu en supposant le milieu en Equilibre Thermodynamique Local. Les émissivités sont en unités arbitraires.

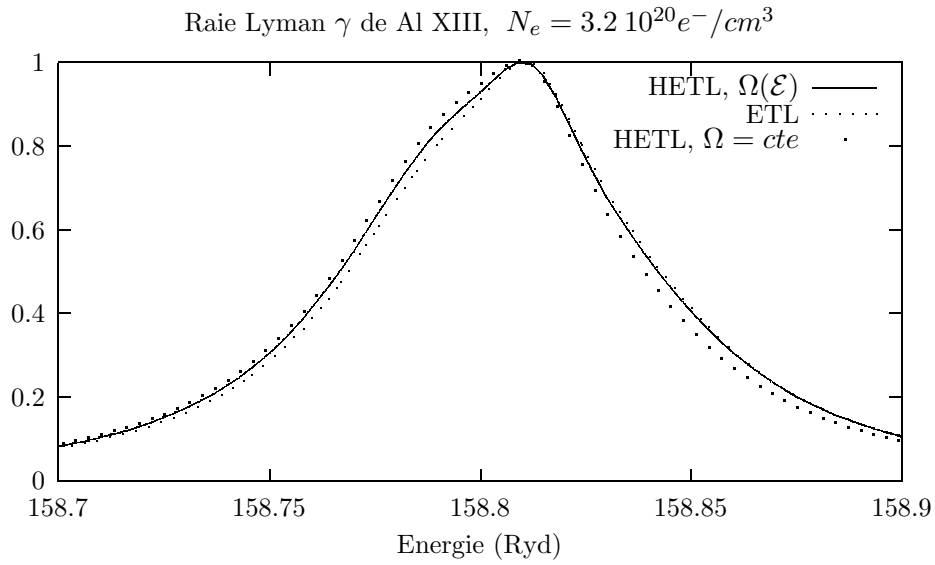


FIG. 5.21 – Même légende que pour la figure précédente, pour une densité électronique $N_e = 3.2 \cdot 10^{20} e^-/cm^3$.

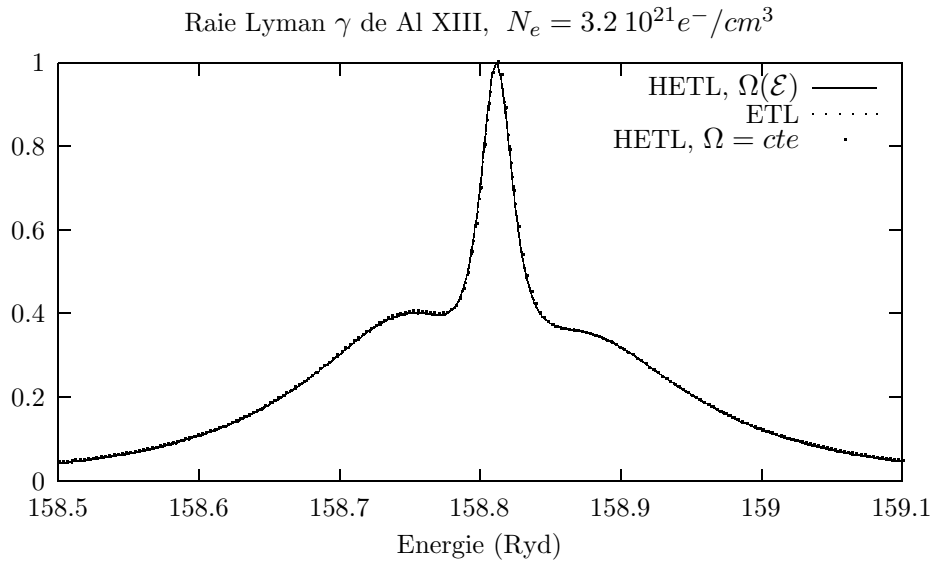


FIG. 5.22 – Même légende que pour la figure précédente, pour une densité électronique $N_e = 3.2 \cdot 10^{21} e^-/cm^3$.

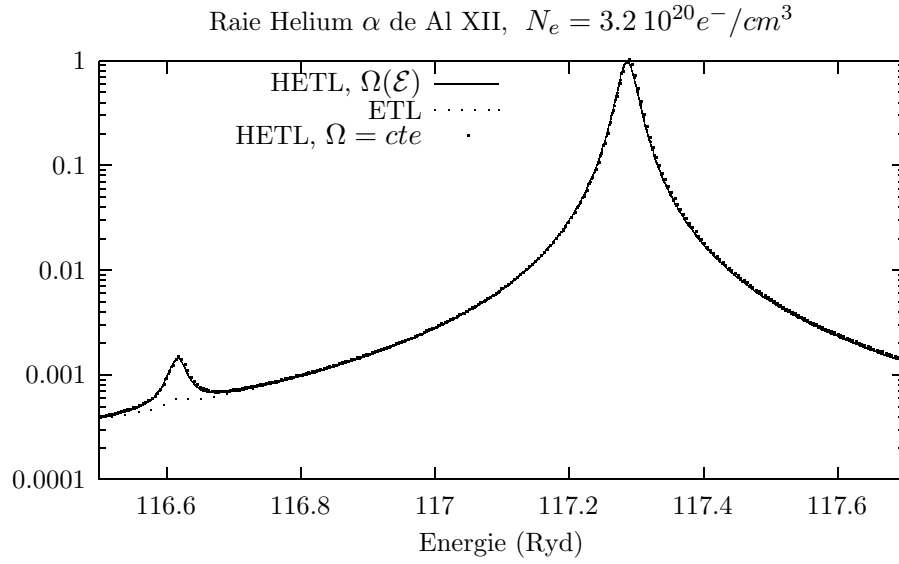


FIG. 5.23 – Profil de la raie Hélium α de l'**Aluminium héliumoïde** à la température $T_e = T_i = 36.76 Ryd = 500 eV$ et à la densité électronique $N_e = 3.2 \cdot 10^{20} e^- / cm^3$, $Z^* = 12$. En trait continu fin, le profil collisionnel radiatif dont tous les taux sont calculés en fonction du champ électrique; en pointillé épais, le profil collisionnel radiatif dont les taux collisionnels sont indépendants du champ électrique, en pointillé fin, le profil obtenu en supposant le milieu en Equilibre Thermodynamique Local. Les émissivités sont en unités arbitraires et en échelle logarithmique.

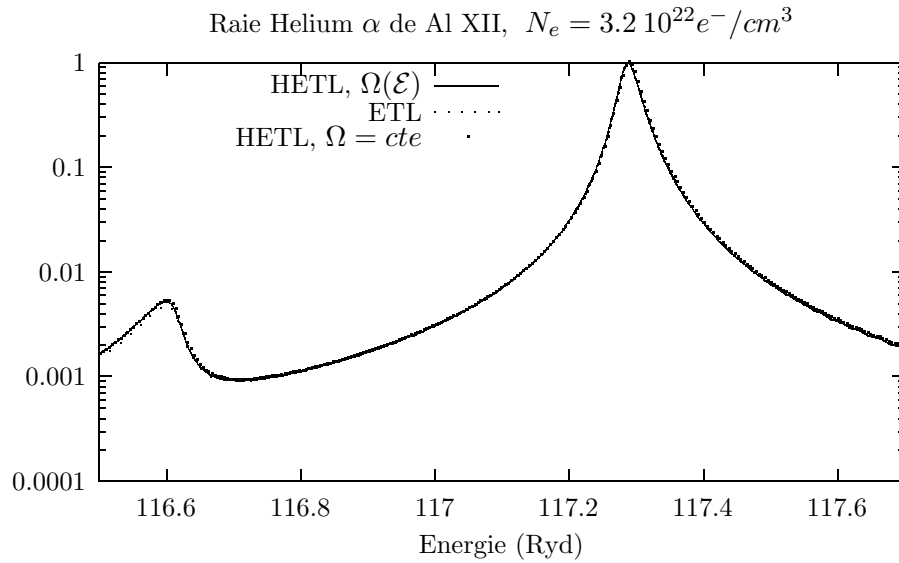


FIG. 5.24 – Même légende que pour la figure précédente, pour une densité électronique $N_e = 3.2 \cdot 10^{22} e^- / cm^3$.

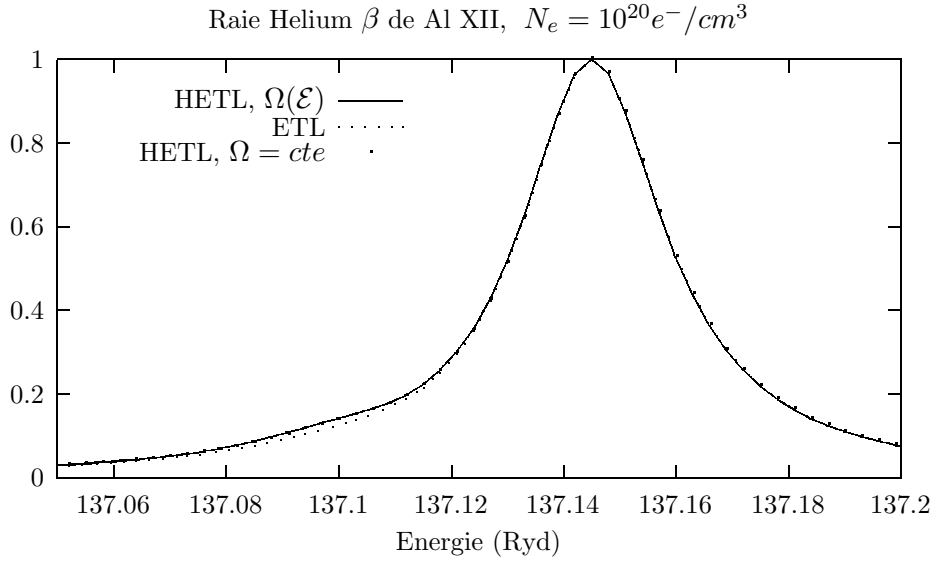


FIG. 5.25 – Profil de la raie Hélium β de l'**Aluminium héliumoïde** à la température $T_e = T_i = 36.76 Ryd = 500 eV$ et à la densité électronique $N_e = 10^{20} e^- / cm^3$, $Z^* = 12$. En trait continu fin, le profil collisionnel radiatif dont tous les taux sont calculés en fonction du champ électrique; en pointillé épais, le profil collisionnel radiatif dont les taux collisionnels sont indépendants du champ électrique, en pointillé fin, le profil obtenu en supposant le milieu en Equilibre Thermodynamique Local. Les émissivités sont en unités arbitraires.

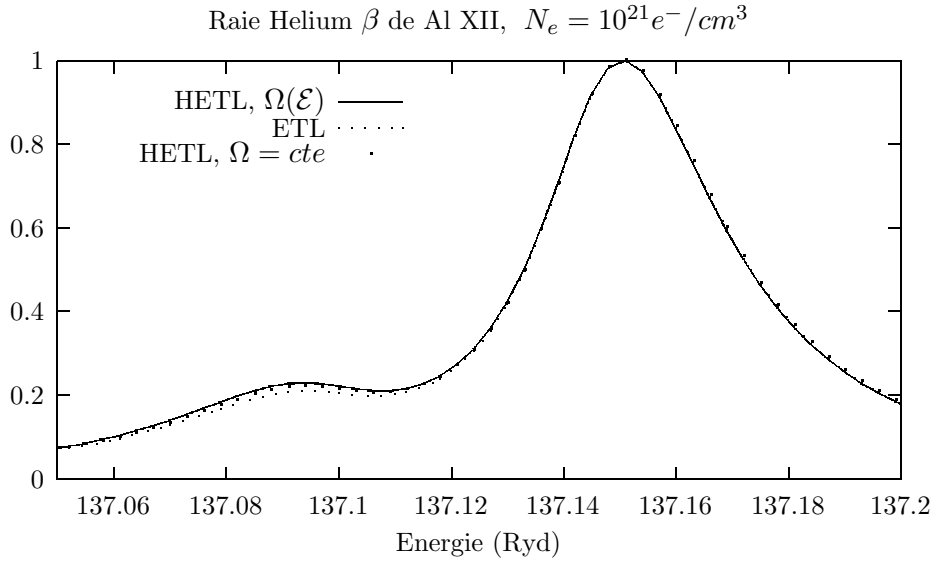


FIG. 5.26 – Même légende que pour la figure précédente, pour une densité électronique $N_e = 10^{21} e^- / cm^3$.

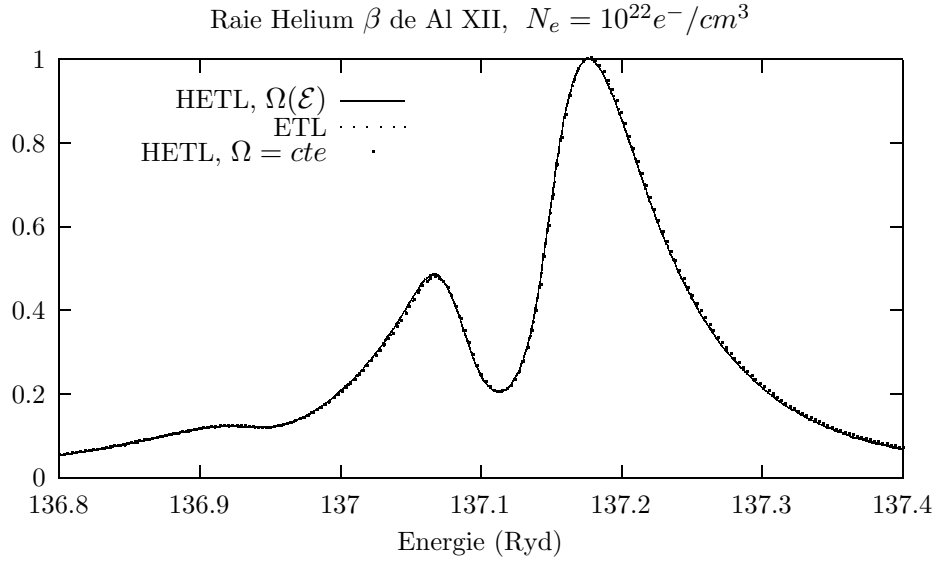


FIG. 5.27 – Même légende que pour la figure précédente, pour une densité électronique $N_e = 10^{22} e^- / cm^3$.

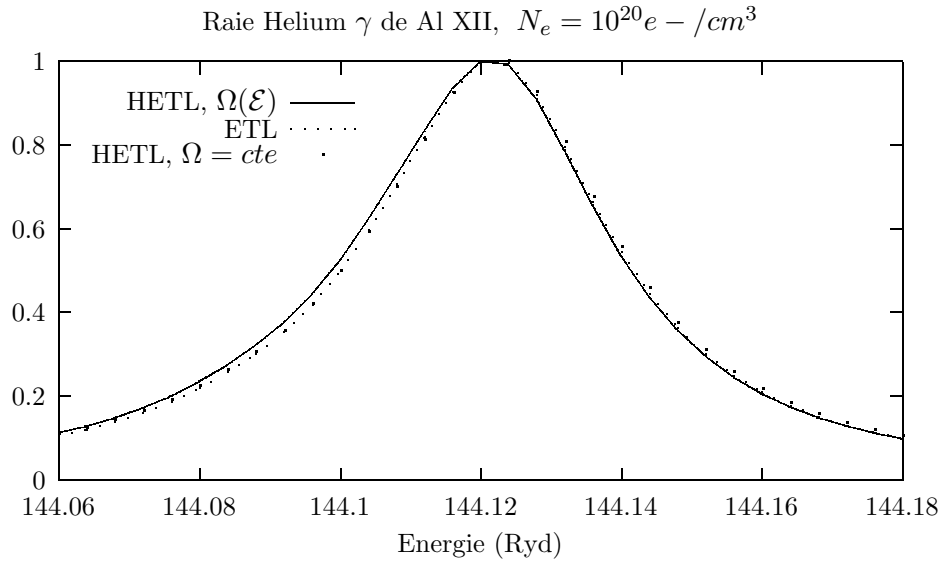


FIG. 5.28 – Profil de la raie Hélium γ de l'**Aluminium héliumöide** à la température $T_e = T_i = 36.76 Ryd = 500 eV$ et à la densité électronique $N_e = 10^{20} e^- / cm^3$, $Z^* = 12$. En trait continu fin, le profil collisionnel radiatif dont tous les taux sont calculés en fonction du champ électrique; en pointillé épais, le profil collisionnel radiatif dont les taux collisionnels sont indépendants du champ électrique, en pointillé fin, le profil obtenu en supposant le milieu en Equilibre Thermodynamique Local. Les émissivités sont en unités arbitraires.

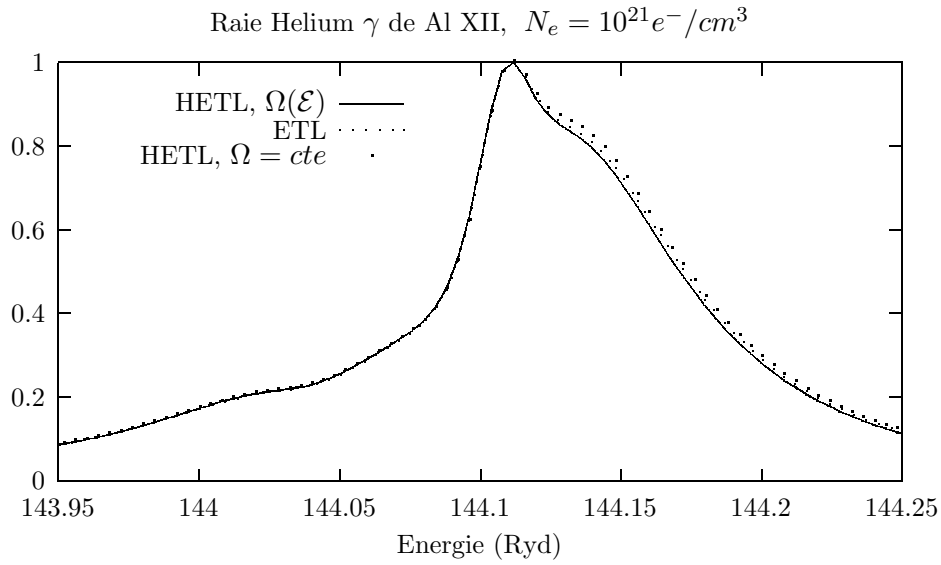


FIG. 5.29 – Même légende que pour la figure précédente, pour une densité électronique $N_e = 10^{21} e^- / cm^3$.

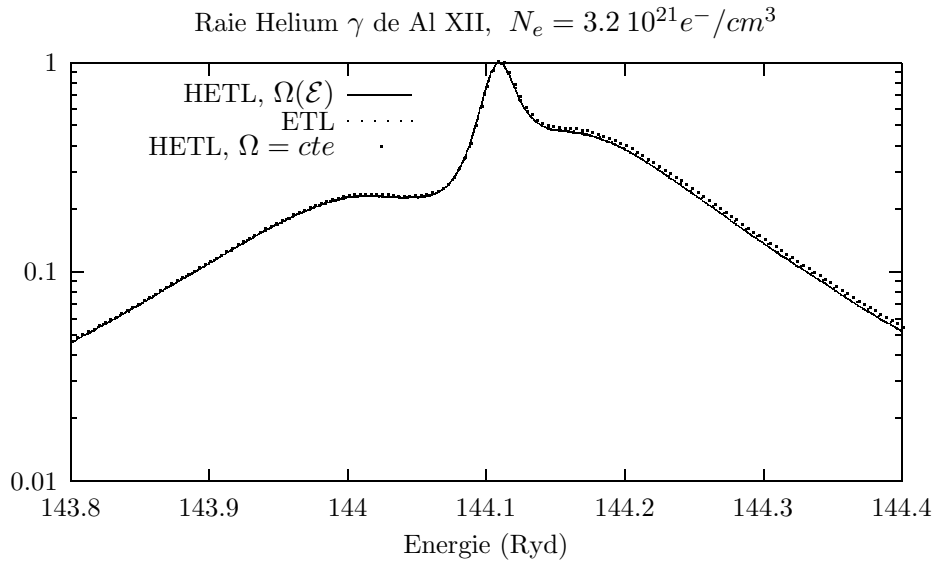


FIG. 5.30 – Même légende que pour la figure précédente, pour une densité électronique $N_e = 3.2 \cdot 10^{21} e^- / cm^3$. Les émissivités sont en échelle logarithmique.

Conclusion

De nombreuses données collisionnelles et radiatives sont nécessaires pour modéliser l'émission X des plasmas hors ETL, qu'ils soient astrophysiques ou de laboratoire. Ces derniers atteignent fréquemment des densités élevées où les sections efficaces classiques, calculées pour de faibles densités, s'avèrent inaptes à reproduire précisément l'ionisation et le profil des raies spectrales obtenues expérimentalement. Notre étude s'est attachée à observer l'influence de la densité et de la température sur les excitations collisionnelles électron-ion, par l'intermédiaire du microchamp ionique, sujet qui n'avait été qu'effleuré, à deux reprises, jusqu'ici.

Nous avons, dans un premier temps, rappelé différentes théories de diffusion inélastique et de microchamp avant d'établir les équations des sections efficaces d'excitation d'un ion perturbé par le champ électrique. La méthode Distorted-Waves choisie offre un bon compromis entre temps de calcul et précision en vue de la réalisation d'une étude numérique. Mais elle ne permet pas d'accéder aux résonances (proches du seuil), qui sont essentiellement le fait de captures diélectroniques peuplant des ions doublement excités. L'effet des résonances reste néanmoins limité lorsque l'on intègre toute une section efficace pour obtenir un taux. Nous avons laissé l'électron libre indifférent au champ électrique perturbateur, ce qui est probablement inadapté à proximité du seuil ; la trajectoire de l'électron le moins véloce est fortement perturbée par le champ. De plus, dans ces conditions, le temps de collision s'allonge, devenant comparable à celui des fluctuations thermiques des ions perturbateurs, mettant la théorie en défaut, comme elle peut l'être dans la description du centre des raies dans les calculs d'élargissement par effet Stark.

Notre seconde étape a consisté à réaliser un code numérique appliquant la théorie précédente à des ions en couplage LSJM pur. Cette limite est imposée par le code de structure atomique et non par celui d'excitation, qui peut être adapté naturellement à des états multiconfigurationnels. Les taux collisionnels en l'absence de champ électrique sont comparables à ceux de la littérature, tandis que la seule étude existante en présence de microchamp présente les mêmes tendances, ce qui valide simultanément notre approche théorique ainsi que le code de calcul.

Enfin, dans un troisième temps, nous avons mis en oeuvre une méthode permettant de calculer un très grand nombre de ces sections efficaces en présence de champ, dans un temps restreint, tout en conservant une très bonne précision pour les taux collisionnels. Ce support de calcul nous a permis de réaliser une ébauche de code Collisionnel-Radiatif incluant les excitations et désexcitations collisionnelles, ainsi que les transitions radiatives dipolaires électriques pour la totalité des niveaux jusqu'à $n=4$ de l'Aluminium Hydrogénoïde et Héliumoïde. Le programme génère les spectres des raies Ly α , β , γ et He α , β et γ à l'équilibre stationnaire.

Nous disposons désormais d'une base complète de forces de collision en présence de champ électrique et donc de taux collisionnels dépendant de la densité pour toutes les transitions précitées. Les transitions interdites, dont les niveaux se mélangent, du fait du champ électrique, avec des niveaux de transitions autorisées, sont accrues très fortement et deviennent de l'ordre des transitions les plus favorables. Ces dernières voient leur intensité décroître pour respecter la conservation des taux globaux entre les groupes de niveaux couplés par l'effet Stark. Ces changements sont beaucoup plus importants, différents et adviennent pour des densités plus faibles, que ceux induits par l'écrantage électronique, responsable d'une réduction systématique des forces de collision, d'autant plus forte que l'interaction est à longue portée. De même que pour la recombinaison diélectronique, ces variations sont d'autant plus conséquentes que n et l sont élevés pour les ions hydrogénoïdes.

Néanmoins, ces effets sont peu visibles sur les profils de raies, dans notre approche, les densités élevées établissant rapidement l'équilibre thermodynamique local. L'élargissement ou le décalage des raies reste très modéré, à proximité des densités de l'équilibre coronal mais augmente d'autant plus que la couche observée a un nombre quantique principal élevé. A haute densité, nous atteignons systématiquement l'équilibre thermodynamique local à l'intérieur de la raie étudiée, gage de la cohérence de nos sections efficaces.

Nous avons restreint la taille mémoire nécessaire et nos temps de calcul des sections efficaces, en limitant le couplage par effet Stark aux seuls niveaux appartenant à la même couche n . Cette contrainte impose que le taux collisionnel global entre deux couches reste indépendant de la densité et ne permet pas de rendre compte des modifications du rapport des hauteurs des différentes raies lorsque le microchamp augmente. Or les couches se mélangent d'autant plus que n est élevé et l'on peut légitimement attendre d'une nouvelle étude adaptée qu'elle mène à un transfert entre leurs populations.

Un tel travail, comportant un grand nombre de couches et de niveaux est hors de propos en couplage LSJM et n'apporte aucune précision supplémentaire dans le calcul des profils de raies au dessus de $n=2$, en raison de l'élargissement électronique.

Le passage à un couplage $LSM_L M_S$ ou quasi hydrogénoïde (à l'image du travail de Gilles et Peyrusse [31]) nous émancipera des contraintes numériques et permettra d'évaluer la modification des taux globaux entre couches. Notons que nous avons d'ores et déjà développé les calculs théoriques nécessaires à cette étude pour le cas hydrogénoïde (formules 4.55 à 4.58).

Ces quelques remarques concernent les améliorations aisément envisageables sur notre code. Nous pourrions y ajouter l'utilisation d'un meilleur modèle d'élargissement électronique ([31] par exemple), la prise en compte d'autres transitions collisionnelles ou radiatives ainsi que l'étude d'atomes plus complexes, lithiumoïdes ou néonoïdes, fréquemment rencontrés à des densités relativement élevées.

De façon plus générale, de nombreux sujets de recherche restent à aborder pour mieux rendre compte des changements de hauteurs de raies. En particulier l'intégration des phénomènes d'écrantage de l'électron libre dans le calcul des excitations collisionnelles en présence de microchamp ainsi que l'extrapolation de cette étude aux ionisations collisionnelles pour obtenir à terme un code collisionnel-radiatif dont tous les taux dépendent de la densité et de la température.

Annexe A

Niveaux de l'Aluminium Hydrogénoïde

Nous présentons dans cette annexe les différents niveaux de l'Aluminium hydrogénoïde pris en compte dans nos calculs. Nous indiquons, en outre, leur énergie, calculée à l'aide de l'équation de Dirac-Pauli, l'énergie de leur transition radiative vers le fondamental ainsi que le sous-groupe de niveaux employé pour leur diagonalisation en présence de champ électrique.

| N^o | Couche n= | Configuration | $ M $ | N^o groupe Stark | Energie (Ryd) | ΔE / fondamental |
|-------|--------------|---------------|-------|-----------------------|------------------|-----------------------------|
| 1 | 4 | $^2F_{7/2}$ | 7/2 | 1 | -10.5640 | 158.8162 |
| 2 | 4 | $^2F_{7/2}$ | 5/2 | 2 | -10.5640 | 158.8162 |
| 3 | 4 | $^2F_{5/2}$ | 5/2 | 2 | -10.5660 | 158.8142 |
| 4 | 4 | $^2D_{5/2}$ | 5/2 | 2 | -10.5660 | 158.8142 |
| 5 | 3 | $^2D_{5/2}$ | 5/2 | 3 | -18.7824 | 150.5978 |
| 6 | 4 | $^2F_{7/2}$ | 3/2 | 4 | -10.5640 | 158.8162 |
| 7 | 4 | $^2F_{5/2}$ | 3/2 | 4 | -10.5660 | 158.8142 |
| 8 | 4 | $^2D_{5/2}$ | 3/2 | 4 | -10.5660 | 158.8142 |
| 9 | 4 | $^2D_{3/2}$ | 3/2 | 4 | -10.5699 | 158.8103 |
| 10 | 4 | $^2P_{3/2}$ | 3/2 | 4 | -10.5699 | 158.8103 |
| 11 | 3 | $^2D_{5/2}$ | 3/2 | 5 | -18.7824 | 150.5978 |
| 12 | 3 | $^2D_{3/2}$ | 3/2 | 5 | -18.7918 | 150.5884 |
| 13 | 3 | $^2P_{3/2}$ | 3/2 | 5 | -18.7918 | 150.5884 |
| 14 | 2 | $^2P_{3/2}$ | 3/2 | 6 | -42.2738 | 127.1064 |

| N^o | Couche n= | Configuration | $ M $ | N^o groupe Stark | Energie (Ryd) | $\Delta E /$ fondamental |
|-------|--------------|---------------|-------|-----------------------|------------------|-----------------------------|
| 15 | 4 | $^2F_{7/2}$ | 1/2 | 7 | -10.5640 | 158.8162 |
| 16 | 4 | $^2F_{5/2}$ | 1/2 | 7 | -10.5660 | 158.8142 |
| 17 | 4 | $^2D_{5/2}$ | 1/2 | 7 | -10.5660 | 158.8142 |
| 18 | 4 | $^2D_{3/2}$ | 1/2 | 7 | -10.5699 | 158.8103 |
| 19 | 4 | $^2P_{3/2}$ | 1/2 | 7 | -10.5699 | 158.8103 |
| 20 | 4 | $^2P_{1/2}$ | 1/2 | 7 | -10.5818 | 158.7984 |
| 21 | 4 | $^2S_{1/2}$ | 1/2 | 7 | -10.5818 | 158.7984 |
| 22 | 3 | $^2D_{5/2}$ | 1/2 | 8 | -18.7824 | 150.5978 |
| 23 | 3 | $^2D_{3/2}$ | 1/2 | 8 | -18.7918 | 150.5884 |
| 24 | 3 | $^2P_{3/2}$ | 1/2 | 8 | -18.7918 | 150.5884 |
| 25 | 3 | $^2P_{1/2}$ | 1/2 | 8 | -18.8200 | 150.5602 |
| 26 | 3 | $^2S_{1/2}$ | 1/2 | 8 | -18.8200 | 150.5602 |
| 27 | 2 | $^2P_{3/2}$ | 1/2 | 9 | -42.2738 | 127.1064 |
| 28 | 2 | $^2P_{1/2}$ | 1/2 | 9 | -42.3688 | 127.0114 |
| 29 | 2 | $^2S_{1/2}$ | 1/2 | 9 | -42.3688 | 127.0114 |
| 30 | 1 | $^2S_{1/2}$ | 1/2 | 10 | -169.3802 | |

Annexe B

Niveaux de l'Aluminium Héliumoïde

De même que dans l'annexe précédente, nous présentons les différents niveaux de l'Aluminium héliumoïde pris en compte dans nos calculs. Leur énergie a été aimablement calculée par Jean Bruneau sur son code MCDF (Multi Configuration Dirac Fock).

| N^o | Couche n= | Configuration | $ M $ | N^o groupe Stark | Energie (Ryd) | $\Delta E /$ fondamental |
|-------|--------------|---------------|-------|-----------------------|------------------|-----------------------------|
| 1 | 1s4l | 3F_4 | 4 | 1 | -178.3542 | 144.1021 |
| 2 | 1s4l | 1F_3 | 3 | 2 | -178.3540 | 144.1024 |
| 3 | 1s4l | 3F_4 | 3 | 3 | -178.3542 | 144.1021 |
| 4 | 1s4l | 3F_3 | 3 | 3 | -178.3556 | 144.1007 |
| 5 | 1s4l | 3D_3 | 3 | 3 | -178.3589 | 144.0974 |
| 6 | 1s3l | 3D_3 | 3 | 4 | -185.3626 | 137.0937 |
| 7 | 1s4l | 1F_3 | 2 | 5 | -178.3540 | 144.1024 |
| 8 | 1s4l | 3F_4 | 2 | 6 | -178.3542 | 144.1021 |
| 9 | 1s4l | 1D_2 | 2 | 5 | -178.3547 | 144.1016 |
| 10 | 1s4l | 3F_2 | 2 | 6 | -178.3554 | 144.1009 |
| 11 | 1s4l | 3F_3 | 2 | 6 | -178.3556 | 144.1007 |
| 12 | 1s4l | 3D_3 | 2 | 6 | -178.3589 | 144.0974 |
| 13 | 1s4l | 3D_2 | 2 | 6 | -178.3609 | 144.0954 |
| 14 | 1s4l | 3P_2 | 2 | 6 | -178.4194 | 144.0369 |

| N^o | Couche n= | Configuration | $ M $ | N^o groupe Stark | Energie (Ryd) | $\Delta E /$ fondamental |
|-------|--------------|---------------|-------|-----------------------|------------------|-----------------------------|
| 15 | 1s3l | 1D_2 | 2 | 7 | -185.3549 | 137.1015 |
| 16 | 1s3l | 3D_3 | 2 | 8 | -185.3626 | 137.0937 |
| 17 | 1s3l | 3D_2 | 2 | 8 | -185.3676 | 137.0887 |
| 18 | 1s3l | 3P_2 | 2 | 8 | -185.5100 | 136.9464 |
| 19 | 1s2l | 3P_2 | 2 | 9 | -205.8844 | 116.5720 |
| 20 | 1s4l | 1P_1 | 1 | 10 | -178.3377 | 144.1186 |
| 21 | 1s4l | 1F_3 | 1 | 10 | -178.3540 | 144.1024 |
| 22 | 1s4l | 3F_4 | 1 | 11 | -178.3542 | 144.1021 |
| 23 | 1s4l | 1D_2 | 1 | 10 | -178.3547 | 144.1016 |
| 24 | 1s4l | 3F_2 | 1 | 11 | -178.3554 | 144.1009 |
| 25 | 1s4l | 3F_3 | 1 | 11 | -178.3556 | 144.1007 |
| 26 | 1s4l | 3D_3 | 1 | 11 | -178.3589 | 144.0974 |
| 27 | 1s4l | 3D_2 | 1 | 11 | -178.3609 | 144.0954 |
| 28 | 1s4l | 3D_1 | 1 | 11 | -178.3612 | 144.0951 |
| 29 | 1s4l | 3P_2 | 1 | 11 | -178.4194 | 144.0369 |
| 30 | 1s4l | 3P_1 | 1 | 11 | -178.4253 | 144.0311 |
| 31 | 1s4l | 3S_1 | 1 | 11 | -178.5351 | 143.9212 |
| 32 | 1s3l | 1P_1 | 1 | 12 | -185.3124 | 137.1439 |
| 33 | 1s3l | 1D_2 | 1 | 12 | -185.3549 | 137.1015 |
| 34 | 1s3l | 3D_3 | 1 | 13 | -185.3626 | 137.0937 |
| 35 | 1s3l | 3D_2 | 1 | 13 | -185.3676 | 137.0887 |
| 36 | 1s3l | 3D_1 | 1 | 13 | -185.3681 | 137.0882 |
| 37 | 1s3l | 3P_2 | 1 | 13 | -185.5100 | 136.9464 |
| 38 | 1s3l | 3P_1 | 1 | 13 | -185.5237 | 136.9326 |
| 39 | 1s3l | 3S_1 | 1 | 13 | -185.7912 | 136.6651 |
| 40 | 1s2l | 1P_1 | 1 | 14 | -205.1693 | 117.2870 |
| 41 | 1s2l | 3P_2 | 1 | 15 | -205.8844 | 116.5720 |
| 42 | 1s2l | 3P_1 | 1 | 15 | -205.9309 | 116.5254 |
| 43 | 1s2l | 3S_1 | 1 | 15 | -206.9047 | 115.5516 |
| 44 | 1s4l | 1P_1 | 0 | 16 | -178.3377 | 144.1186 |
| 45 | 1s4l | 1F_3 | 0 | 16 | -178.3540 | 144.1024 |
| 46 | 1s4l | 3F_4 | 0 | 17 | -178.3542 | 144.1021 |
| 47 | 1s4l | 1D_2 | 0 | 16 | -178.3547 | 144.1016 |
| 48 | 1s4l | 3F_2 | 0 | 17 | -178.3554 | 144.1009 |
| 49 | 1s4l | 3F_3 | 0 | 18 | -178.3556 | 144.1007 |

| N^o | Couche n= | Configuration | $ M $ | N^o groupe Stark | Energie (Ryd) | $\Delta E /$ fondamental |
|-------|-----------------|---------------|-------|-----------------------|------------------|-----------------------------|
| 50 | 1s4l | 3D_3 | 0 | 17 | -178.3589 | 144.0974 |
| 51 | 1s4l | 3D_2 | 0 | 18 | -178.3609 | 144.0954 |
| 52 | 1s4l | 3D_1 | 0 | 17 | -178.3612 | 144.0951 |
| 53 | 1s4l | 1S_0 | 0 | 16 | -178.4176 | 144.0387 |
| 54 | 1s4l | 3P_2 | 0 | 17 | -178.4194 | 144.0369 |
| 55 | 1s4l | 3P_1 | 0 | 18 | -178.4253 | 144.0311 |
| 56 | 1s4l | 3P_0 | 0 | 17 | -178.4268 | 144.0295 |
| 57 | 1s4l | 3S_1 | 0 | 17 | -178.5351 | 143.9212 |
| 58 | 1s3l | 1P_1 | 0 | 19 | -185.3124 | 137.1439 |
| 59 | 1s3l | 1D_2 | 0 | 19 | -185.3549 | 137.1015 |
| 60 | 1s3l | 3D_3 | 0 | 20 | -185.3626 | 137.0937 |
| 61 | 1s3l | 3D_2 | 0 | 21 | -185.3676 | 137.0887 |
| 62 | 1s3l | 3D_1 | 0 | 20 | -185.3681 | 137.0882 |
| 63 | 1s3l | 1S_0 | 0 | 19 | -185.5051 | 136.9512 |
| 64 | 1s3l | 3P_2 | 0 | 20 | -185.5100 | 136.9464 |
| 65 | 1s3l | 3P_1 | 0 | 21 | -185.5237 | 136.9326 |
| 66 | 1s3l | 3P_0 | 0 | 20 | -185.5273 | 136.9290 |
| 67 | 1s3l | 3S_1 | 0 | 20 | -185.7912 | 136.6651 |
| 68 | 1s2l | 1P_1 | 0 | 22 | -205.1693 | 117.2870 |
| 69 | 1s2l | 1S_0 | 0 | 22 | -205.8374 | 116.6189 |
| 70 | 1s2l | 3P_2 | 0 | 23 | -205.8844 | 116.5720 |
| 71 | 1s2l | 3P_1 | 0 | 24 | -205.9309 | 116.5254 |
| 72 | 1s2l | 3P_0 | 0 | 23 | -205.9422 | 116.5141 |
| 73 | 1s2l | 3S_1 | 0 | 23 | -206.9047 | 115.5516 |
| 74 | 1s ² | 1S_0 | 0 | 25 | -322.4563 | |

Annexe C

Fonctions d'onde libres

La détermination numérique des fonctions d'onde du continu est fondée sur le même principe que celle des fonctions d'onde liées avec quelques spécificités supplémentaires dues à leur caractère oscillatoire et à leur normalisation.

Nous avons développé les aspects théoriques de leur calcul au paragraphe 4.4.1, retenons leur amplitude à l'infini qui vaut $\frac{1}{E^{1/4}}$ ainsi que l'équation différentielle 4.25 qui les décrit :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + E - U(r) \right] F_l^E(r) = 0 \quad (\text{C.1})$$

où E est l'énergie cinétique (en Ryd) de l'électron libre et $U(r)$ le potentiel créé par l'ion cible.

En raison du comportement exponentiel initial (similaire à celui des électrons liés) et ultérieurement oscillant, la résolution de cette équation nécessite deux maillages successifs : exponentiel puis arithmétique.

L'équation est du type $y'' = f(r)y$ qui peut être résolue à l'aide de la méthode d'intégration de Numerov [19] :

$$y_{n+1} \left(1 - \frac{1}{12} h^2 f_{n+1} \right) = 1 \left(1 + \frac{5}{12} h^2 f_n \right) y_n - \left(1 - \frac{1}{12} h^2 f_{n-1} \right) y_{n-1} \quad (\text{C.2})$$

avec une très bonne précision de l'ordre de h^6 où h est le pas d'intégration.

En pas exponentiel, cette équation s'écrit :

$$u''(x) = [(l + 0.5)^2 + (V(r) - E)r^2]u(x) \quad (\text{C.3})$$

avec $u(x) = \frac{P_l^E(r)}{\sqrt{r}}$, $r = e^x$, $h = \Delta x$ et donc : $f_n = (l + 0.5)^2 + (U(r_n) - E)r_n^2$.

En pas arithmétique :

$$P''(r) + \left(E - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) P(r) = 0 \quad (\text{C.4})$$

où $h = \Delta r$ et $f_n = U(r_n) - E + \frac{l(l+1)}{r_n^2}$.

Il faut au minimum cinq points par arche lors de l'intégration de la partie oscillante, de façon à conserver une précision satisfaisante. Nous avons calculé les forces de collision pour des énergies atteignant 20 fois l'énergie du seuil de l'excitation. Dans ces conditions, à l'aide de l'équation précédente, le pas minimum d'intégration arithmétique vaut :

$$\Delta r_{min} = \frac{\pi}{5\sqrt{20E_{seuil}}} \gtrsim \frac{\pi}{25\sqrt{E_{ionisation}}} \quad (C.5)$$

où $E_{ionisation}$ est l'énergie d'ionisation du fondamental.

Le changement du pas exponentiel au pas arithmétique s'effectue lorsque $r(n_{ar}) - r(n_{ar} - 1) \approx \Delta r_{min}$, c'est à dire pour le pas :

$$n_{ar} \approx 2 + \frac{1}{h_e} \ln \left(\frac{h_a}{r(1) \cdot (e^{h_e} - 1)} \right) \quad (C.6)$$

où h_e est le pas exponentiel fixé par le code de structure atomique et $h_a \approx \Delta r_{min}$ le pas arithmétique.

Une détermination précise des fonctions d'onde à l'origine (les deux premiers pas) conditionne leur précision ultérieure. Nous avons repris la méthode utilisée pour le calcul des fonctions d'onde liées. D'après l'équation C.3 le comportement initial de la fonction u est du type $u(x) \xrightarrow[r \rightarrow 0]{} p_0 r^{l+1/2}$. Nous pouvons donc effectuer son développement limité :

$$u(x) = [p_0 + a_2 r + a_3 r^2 + a_4 r^3 + \mathcal{O}(r^3)] r^{l+1/2} \quad (C.7)$$

ainsi que celui du potentiel :

$$U(r) = -\frac{2Z}{r} + p_1 + p_2 r + p_3 r^2 + p_4 r^3 + \mathcal{O}(r^3). \quad (C.8)$$

Le développement de l'équation C.3 permet de déterminer ces coefficients :

$$\begin{aligned} -a_2 &= \frac{-Zp_0}{l+1} \\ -a_3 &= \frac{(p_1 - E)p_0 - 2Za_2}{4l+6} \\ -a_4 &= \frac{p_2 p_0 + (p_1 - E)a_2 - 2Za_3}{6l+12} \\ -p_1 &\approx \frac{(U(r_2) + 2Z/r_2) - (U(r_1) + 2Z/r_1)r_2}{r_1 - r_2} \\ -p_2 &\approx \frac{(U(r_1) - 2Z/r_1) - (U(r_2) + 2Z/r_2)r_1}{r_1 - r_2} \end{aligned}$$

p_3 et p_4 n'intervenant pas.

De même que pour l'origine, la détermination précise de l'amplitude à l'infini conditionne beaucoup la précision des calculs. La fonction d'onde peut s'écrire pour un grand rayon :

$$P_E(r) \sim \frac{A(r, E)}{E^{1/4}} \cos(\sqrt{E} r + \delta) \quad (C.9)$$

où δ est un terme de déphasage et $A(r, E)$ est l'amplitude normalisée à l'infini de la fonction d'onde dont Cowan [19] donne l'expression asymptotique :

$$A(r, E) \approx 1 - \frac{Z_c}{2Er} \left[1 - \frac{5Z_c}{4Er} - \frac{l(l+1)}{2Z_cr} \right]. \quad (\text{C.10})$$

Z_c est la charge ionique vue par l'électron libre. Cette expression asymptotique est vérifiée au delà d'un rayon minimum que Cowan caractérise par :

$$r_0 > \max \left(\frac{10Z_c}{E}, \frac{5l(l+1)}{Z_c}, r_c = \begin{array}{l} \text{extension maxi-} \\ \text{mum des } e^- \text{ liés} \end{array} \right). \quad (\text{C.11})$$

Dans ces conditions, numériquement, la fonction $P_E(r)$ normalisée s'obtient suivant :

$$P_E(r) = \frac{A(r_0, E)}{E^{1/4}} \frac{P_E^{\text{non normalisée}}(r)}{\text{Amplitude}(P_E^{\text{non normalisée}}(r_0))}, \quad (\text{C.12})$$

l'amplitude de $P_E^{\text{non normalisée}}(r)$ étant déterminée en interpolant deux points proches de r_0 : y_1 et y_2 obtenus numériquement, par une sinusoïde de fréquence :

$$\text{freq} = \sqrt{E - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}}. \quad (\text{C.13})$$

L'amplitude vaut alors :

$$\text{Amplitude}(P_E^{\text{non normalisée}}(r_0)) = \sqrt{y_1^2 + \left(\frac{y_1 \cos(\text{freq } h_a) - y_2}{\sin(\text{freq } h_a)} \right)^2} \quad (\text{C.14})$$

où h_a est le pas arithmétique de l'intégration.

Annexe D

Eléments de matrice coulombiens : excitation d'ions complexes

Ces pages sont très largement inspirées de Cowan [19] (Chapitre 13), les éléments de matrice coulombiens caractérisistiques des excitations collisionnelles électron ion étant les mêmes que les éléments coulombiens employés pour la détermination de la structure atomique dans une approche multiconfigurationnelle.

Nous rappelons la structure de couplage employée dans le reste de cet ouvrage :

$$\left\{ \left[(l_1^{w_1} \alpha_1 L_1 S_1 \mathfrak{L}_1 \mathfrak{S}_1, l_2^{w_2} \alpha_2 L_2 S_2) \mathfrak{L}_2 \mathfrak{S}_2, \dots, l_q^{w_q} \alpha_q L_q S_q \right] \mathfrak{L}_q \mathfrak{S}_q \right\} \mathfrak{J}_q \mathfrak{M}_q.$$

Sous peine de rentrer dans un catalogue fort long et fastidieux de toutes les situations, il faut, ici, se restreindre au seul cas des excitations collisionnelles.

Les électrons liés sont distribués dans les sous-couches 1 à $q - 2$ et les électrons libres attachés à $q - 1$ et q . L'état initial correspond à un électron libre dans la sous-couche q et aucun dans la $q - 1^{eme}$, l'état final inverse cette situation.

Deux classes traitées par Cowan sont à extraire, les 6 et 10 (Chapitre 13-10, Fig 13-5 et formules 13-83, 13-84 et 13-91, 13-92).

Dans le cas traité, le lié initial est dans l'état fondamental ρ tandis que le libre, très énergétique, est dans l'état σ ; le lié final est excité, indicé ρ' et le libre σ' est moins énergétique.

Pour des transitions entre configurations distinctes, un classement énergétique des orbitales donne $\rho < \rho' < \sigma' < \sigma$, soit le cas 10b de Cowan. Dans le cas d'états mélangés par exemple par le champ électrique, le classement n'est pas modifié mais il existe des éléments de matrice tels que $\rho = \rho' < \sigma' < \sigma$ (classe n^o6 en intervertissant les orbitales ' et non ') et $\rho' < \rho < \sigma' < \sigma$ (classe n^o10a , de même, en intervertissant

les orbitales ' et non ').

L'élément de matrice coulombien peut s'écrire :

$$\begin{aligned} < \Psi_b | \sum_{i < j} \sum_k \frac{2r_{ij}^k}{r_{ij}^{k+1}} C_{(i)}^{(k)} \cdot C_{(j)}^{(k)} | \Psi_{b'} > \\ &= \sum_{\rho\sigma\rho'\sigma'} \sum_k \left[r_d^k R_d^k(l_\rho l_\sigma, l_{\rho'} l_{\sigma'}) + r_e^k R_e^k(l_\rho l_\sigma, l_{\sigma'} l_{\rho'}) \right]. \end{aligned}$$

Les coefficients $R_d^k(l_\rho l_\sigma, l_{\rho'} l_{\sigma'})$ et $R_e^k(l_\rho l_\sigma, l_{\sigma'} l_{\rho'})$ sont les intégrales radiales doubles, directe et d'échange 4.42. Les coefficients angulaires r_d^k et r_e^k sont calculés comme le produit de plusieurs facteurs élémentaires. Quelques coefficients intermédiaires sont nécessaires pour expliciter ces facteurs :

les coefficients de recouplage :

- déplacement (shift)

$$\begin{aligned} R_s(j_1 j_2 J', j_3 J, J'') &\equiv < [(j_1 j_2) J', j_3] J | [j_1, (j_2 j_3) J''] J > \\ &= (-1)^{j_1 + j_2 + j_3 + J} [J', J'']^{1/2} \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & J' \\ j_3 & J & J'' \end{matrix} \right\} \end{aligned}$$

- saut (jump)

$$\begin{aligned} R_j(j_1 j_2 J', j_3 J, J'') &\equiv < [(j_1 j_2) J', j_3] J | [j_1, (j_3 j_2) J''] J > \\ &= (-1)^{j_1 + J + J''} [J', J'']^{1/2} \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & J' \\ j_3 & J & J'' \end{matrix} \right\} \end{aligned}$$

- échange (exchange)

$$\begin{aligned} R_x(j_1 j_2 J', j_3 J, J'') &\equiv < [(j_1 j_2) J', j_3] J | [(j_1 j_3) J'', j_2] J > \\ &= (-1)^{j_2 + j_3 + J' + J''} [J', J'']^{1/2} \left\{ \begin{matrix} j_2 & j_1 & J' \\ j_3 & J & J'' \end{matrix} \right\} \end{aligned}$$

(Ces trois termes valent 1 si j_2 ou j_3 est nul ainsi que R_x si j_1 est nul.)

les opérateurs de découplage :

si $T^{(k)}$ et $W^{(k)}$ agissent sur les électrons 1 et 2 respectivement :

$$< \alpha_1 j_1 \alpha_2 j_2 j \| T^{(k)} \| \alpha'_1 j'_1 \alpha'_2 j'_2 j' > = \delta_{\alpha_2 j_2, \alpha'_2 j'_2} U_a(j_1 j_2 j; k; j'_1 j') < \alpha_1 j_1 \| T^{(k)} \| \alpha'_1 j'_1 >,$$

$$< \alpha_1 j_1 \alpha_2 j_2 j \| W^{(k)} \| \alpha'_1 j'_1 \alpha'_2 j'_2 j' > = \delta_{\alpha_1 j_1, \alpha'_1 j'_1} U_b(j_1 j_2 j; k; j'_2 j') < \alpha_2 j_2 \| W^{(k)} \| \alpha'_2 j'_2 >,$$

où

$$U_a(j_1 j_2 j; k; j'_1 j') = (-1)^{j_1 + j_2 + j' + k} [j, j']^{1/2} \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j \\ j' & k & j'_1 \end{matrix} \right\}$$

(opérateur de découplage "à droite" qui permet de "s'affranchir" de la couche succédant à j_1)

et

$$U_b(j_1 j_2 j; k; j'_2 j') = (-1)^{j_1 + j'_2 + j + k} [j, j']^{1/2} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ k & j' & j'_2 \end{Bmatrix}$$

(permet de "s'affranchir" de la couche précédant j_2).

Enfin, le découplage de deux opérateurs agissant sur des électrons distincts s'écrit :

$$\begin{aligned} & \langle \alpha_1 j_1 \alpha_2 j_2 j \| T^{(k)} W^{(k)} \| \alpha'_1 j'_1 \alpha'_2 j'_2 j' \rangle \\ &= \delta_{j_m, j'_m} (-1)^{j'_1 + j_2 + j} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ j'_2 & j'_1 & k \end{Bmatrix} \langle \alpha_1 j_1 \| T^{(k)} \| \alpha'_1 j'_1 \rangle \langle \alpha_2 j_2 \| W^{(k)} \| \alpha'_2 j'_2 \rangle. \end{aligned}$$

Le premier facteur des coefficients angulaires r_d^k et r_e^k , résultant de l'orthonormalité des fonctions d'onde et de la conservation des quantités de mouvement, est un produit de fonctions delta :

$$\begin{aligned} B_1 = \delta_{j_q j'_q} & \left[\prod_m \delta_{\alpha_m L_m S_m, \alpha'_m L'_m S'_m} \right]_{m \neq \rho \sigma \rho' \sigma'} \\ & \times \left[\prod_m \delta_{\mathfrak{L}_m \mathfrak{S}_m, \mathfrak{L}'_m \mathfrak{S}'_m} \right]_{m < \rho, m \geq \max(\sigma, \sigma')}. \end{aligned}$$

Le second prend en compte phase et nombres d'occupation :

$$B_2 = (-1)^{\Delta p} \frac{[w_\rho(w_\sigma - \delta_{\rho, \sigma}) w'_{\rho'}(w'_{\sigma'} - \delta_{\rho', \sigma'})]^{1/2}}{(1 + \delta_{\rho, \sigma} \delta_{\rho', \sigma'})}$$

$$\text{avec } \Delta p = \delta_{\rho, \sigma} - \delta_{\rho', \sigma'} + \sum_{j=\rho+1}^{\sigma} w_j - \sum_{j=\rho'+1}^{\sigma'} w'_j.$$

Il faut encore ajouter les coefficients de parentage fractionnel issus des sauts d'électrons d'une sous-couche à l'autre :

$$B_{3i} = (l_i^{w_i} \alpha_i L_i S_i \{ | l_i^{w_i-1} \alpha'_i L'_i S'_i \}) \quad i = \rho \text{ et/ou } \sigma$$

ou

$$B_{4i} = (l_i^{w'_i-1} \alpha_i L_i S_i \{ | l_i^{w'_i} \alpha'_i L'_i S'_i \}) \quad i = \rho' \text{ et/ou } \sigma'.$$

Il existe deux possibilités de recouplage principales :

- soit faire passer un électron d'une sous-couche ρ vers une autre moins profonde $i = \min(\rho', \sigma)$. Si $\rho < i$, il est nécessaire d'adjoindre à r^k le facteur :

$$B_5 = \left[\delta_{\rho 1} + (1 - \delta_{\rho 1}) R_s(\mathfrak{L}_{\rho-1} L'_\rho \mathfrak{L}'_\rho, l_\rho \mathfrak{L}_\rho, L_\rho) \right] \\ \times \left[\prod_{m=\rho+1}^{i-1} R_x(\mathfrak{L}'_{m-1} l_\rho \mathfrak{L}_{m-1}, L_m \mathfrak{L}_m, \mathfrak{L}'_m) \right] \\ \times \left[\begin{array}{c} \text{termes de spin équivalents, en} \\ \text{remplaçant les } l, \mathfrak{L}, L \text{ par } s, \mathfrak{S}, S. \end{array} \right]$$

(Le premier facteur correspond au recouplage des $w_\rho - 1$ électrons de la sous-couche ρ , non impliqués dans la transition, avec les électrons des couches plus profondes, le deuxième terme "fait passer" l'électron actif "au dessus" de la couche qui lui succède ; cette opération transforme :

$$\{[\mathfrak{L}_{\rho-1}, (l_\rho^{w_\rho-1} \alpha'_\rho L'_\rho, l_\rho) \alpha_\rho L_\rho] \mathfrak{L}_\rho \cdots L_{i-1}\} \mathfrak{L}_{i-1}, l_i^{w_i} \alpha_i \cdots$$

en

$$\{[(\mathfrak{L}_{\rho-1}, l_\rho^{w_\rho-1} \alpha'_\rho L'_\rho) \mathfrak{L}'_\rho, l_{\rho+1}^{w_{\rho+1}} \alpha_{\rho+1} \cdots l_{i-1}^{w_{i-1}} \alpha_{i-1} L_{i-1}] \mathfrak{L}'_{i-1}, l_\rho \} \mathfrak{L}_{i-1}, l_i^{w_i} \alpha_i \cdots \}.$$

- soit transférer le plus "extérieur" des électrons (supposé appartenir à σ') vers la sous-couche $j = \max(\sigma, \rho')$. Si $j < \sigma'$, de même que précédemment, il s'ajoute un facteur :

$$B'_6 = R_j(\mathfrak{L}'_{\sigma'-1} l_{\sigma'} \mathfrak{L}_{\sigma'-1}, L_{\sigma'} \mathfrak{L}'_{\sigma'}, L'_{\sigma'}) \\ \times \left[\prod_{m=j+1}^{\sigma'-1} R_x(\mathfrak{L}'_{m-1} L_m \mathfrak{L}'_m, l_{\sigma'} \mathfrak{L}_m, \mathfrak{L}_{m-1}) \right] \\ \times \left[\begin{array}{c} \text{termes de spin équivalents, en} \\ \text{remplaçant les } l, \mathfrak{L}, L \text{ par } s, \mathfrak{S}, S. \end{array} \right]$$

Soit le couplage de

$$\{(\mathfrak{L}'_j, l_{j+1}^{w_{j+1}} \alpha'_{j+1} L'_{j+1}) \mathfrak{L}'_{j+1} \cdots \mathfrak{L}'_{\sigma'-1}, [l_{\sigma'}^{w_{\sigma'}-1} \alpha_{\sigma'} L_{\sigma'}, l_{\sigma'}] \alpha'_{\sigma'} L'_{\sigma'}\} \mathfrak{L}'_{\sigma'} \cdots$$

avec

$$\{[(\mathfrak{L}'_j, l_{\sigma'}) \mathfrak{L}_j, l_{j+1}^{w_{j+1}} \alpha'_{j+1} L'_{j+1} \cdots L_{\sigma'-1}] \mathfrak{L}_{\sigma'-1}, l_{\sigma'}^{w_{\sigma'}-1} \alpha_{\sigma'} L_{\sigma'}\} \mathfrak{L}_{\sigma'} \cdots$$

(Dans le cas où l'électron le plus extrême se trouve dans σ et non dans σ' , il est nécessaire d'inverser les termes primés et non-primés dans B'_6 , qui devient B_6 .)

$$- \rho < \rho' < \sigma' < \sigma$$

Les configurations initiales et finales peuvent s'écrire (en laissant cachés les nombres quantiques de spin) :

$$(\cdots (\mathfrak{L}_{\rho-1}, l_{\rho}^{w_{\rho}} \alpha_{\rho} L_{\rho}) \mathfrak{L}_{\rho}, L_{inter}) \mathfrak{L}_{inter}, l_{\rho'}^{w_{\rho'}} \alpha_{\rho'} L_{\rho'}) \mathfrak{L}_{\rho'}, L_{peel}) \mathfrak{L}_{peel}, \\ l_{\sigma'}^{w_{\sigma'}} \alpha_{\sigma'} L_{\sigma'}) \mathfrak{L}_{\sigma'}, L_{fin}) \mathfrak{L}_{fin}, l_{\sigma}^{w_{\sigma}} \alpha_{\sigma} L_{\sigma}) \mathfrak{L}_{\sigma}$$

et

$$(\cdots (\mathfrak{L}'_{\rho-1}, l_{\rho}^{w'_{\rho}} \alpha'_{\rho} L'_{\rho}) \mathfrak{L}'_{\rho}, L_{inter}) \mathfrak{L}'_{inter}, l_{\rho'}^{w'_{\rho'}} \alpha'_{\rho'} L'_{\rho'}) \mathfrak{L}'_{\rho'}, L_{peel}) \mathfrak{L}'_{peel}, \\ l_{\sigma'}^{w'_{\sigma'}} \alpha'_{\sigma'} L'_{\sigma'}) \mathfrak{L}'_{\sigma'}, L_{fin}) \mathfrak{L}'_{fin}, l_{\sigma}^{w'_{\sigma}} \alpha'_{\sigma} L'_{\sigma}) \mathfrak{L}_{\sigma}$$

où *inter*, *peel* et *fin* rassemblent les électrons intermédiaires n'intervenant pas directement dans l'interaction.

L'action des facteurs $B_{3\rho} B_{3\sigma} B_{4\rho'} B_{4\sigma'} B_5 B_6$ permet de transformer ces configurations en :

$$(\cdots (\mathfrak{L}_{\rho-1}, l_{\rho}^{w'_{\rho}} \alpha'_{\rho} L'_{\rho}) \mathfrak{L}'_{\rho}, L_{inter}) \mathfrak{L}'_{inter}, l_{\rho}) \mathfrak{L}'_{inter}, l_{\rho'}^{w_{\rho'}} \alpha_{\rho'} L_{\rho'}) \mathfrak{L}_{\rho'}, L_{peel}) \mathfrak{L}_{peel}, \\ l_{\sigma'}^{w_{\sigma'}} \alpha_{\sigma'} L_{\sigma'}) \mathfrak{L}_{\sigma'}, l_{\sigma}) \mathfrak{L}'_{\sigma'}, L_{fin}) \mathfrak{L}'_{fin}, l_{\sigma}^{w'_{\sigma}} \alpha'_{\sigma} L'_{\sigma}) \mathfrak{L}_{\sigma}$$

et

$$(\cdots (\mathfrak{L}'_{\rho-1}, l_{\rho}^{w'_{\rho}} \alpha'_{\rho} L'_{\rho}) \mathfrak{L}'_{\rho}, L_{inter}) \mathfrak{L}'_{inter}, (l_{\rho'}^{w_{\rho'}} \alpha_{\rho'} L_{\rho'}, l_{\rho'}) L'_{\rho'}) \mathfrak{L}'_{\rho'}, L_{peel}) \mathfrak{L}'_{peel}, \\ (l_{\sigma'}^{w_{\sigma'}} \alpha_{\sigma'} L_{\sigma'}, l_{\sigma'}) L'_{\sigma'}) \mathfrak{L}'_{\sigma'}, L_{fin}) \mathfrak{L}'_{fin}, l_{\sigma}^{w'_{\sigma}} \alpha'_{\sigma} L'_{\sigma}) \mathfrak{L}_{\sigma}.$$

Soit :

$$(\cdots (\mathfrak{L}'_{\rho'-1}, l_{\rho}) \mathfrak{L}'_{\rho'-1}, l_{\rho'}^{w_{\rho'}} \alpha_{\rho'} L_{\rho'}) \mathfrak{L}_{\rho'}, \cdots L_{\sigma'-1}) \mathfrak{L}_{\sigma'-1}, l_{\sigma}^{w_{\sigma}} \alpha_{\sigma} L_{\sigma'}) \mathfrak{L}_{\sigma'}, l_{\sigma}) \mathfrak{L}'_{\sigma'}$$

et

$$(\cdots (\mathfrak{L}'_{\rho'-1}, (l_{\rho'}^{w_{\rho'}} \alpha_{\rho'} L_{\rho'}, l_{\rho'}) L'_{\rho'}) \mathfrak{L}'_{\rho'}, \cdots L_{\sigma'-1}) \mathfrak{L}'_{\sigma'-1}, (l_{\sigma'}^{w_{\sigma'}} \alpha_{\sigma'} L_{\sigma'}, l_{\sigma'}) L'_{\sigma'}) \mathfrak{L}'_{\sigma'}.$$

Dans la configuration initiale, l'opérateur d'échange permet de sortir les sous-couches $l_{\rho'}^{w_{\rho'}} \alpha_{\rho'} L_{\rho'} S_{\rho'}$ et $l_{\sigma'}^{w_{\sigma'}} \alpha_{\sigma'} L_{\sigma'} S_{\sigma'}$:

$$R_x(\mathfrak{L}'_{\rho'-1} l_{\rho} \mathfrak{L}_{\rho'-1}, L_{\rho'} \mathfrak{L}_{\rho'}, \mathfrak{L}). R_x(\mathfrak{L}_{\sigma'-1} L_{\sigma'} \mathfrak{L}_{\sigma'}, l_{\sigma} \mathfrak{L}'_{\sigma'}, \mathfrak{L}') \times [spins]$$

transforme la configuration initiale en :

$$(\cdots (\mathfrak{L}'_{\rho'-1}, l_{\rho'}^{w_{\rho'}} \alpha_{\rho'} L_{\rho'}) \mathfrak{L}, l_{\rho}) \mathfrak{L}_{\rho'}, \cdots L_{\sigma'-1}) \mathfrak{L}_{\sigma'-1}, l_{\sigma}) \mathfrak{L}'_{\sigma'}, l_{\sigma}^{w_{\sigma}} \alpha_{\sigma} L_{\sigma'}) \mathfrak{L}'_{\sigma'}.$$

De façon similaire, sur la configuration finale, les opérateurs de déplacement et de saut permettent d'isoler les derniers électrons de ρ' et σ' de leurs sous-couches mères en expulsant ces dernières :

$$R_s(\mathfrak{L}'_{\rho'-1} L_{\rho'} \mathfrak{L}, l_{\rho'} \mathfrak{L}'_{\rho'}, L'_{\rho'}) . R_j(\mathfrak{L}'_{\sigma'-1} l_{\sigma'} \mathfrak{L}', L_{\sigma'} \mathfrak{L}'_{\sigma'}, L'_{\sigma'}) \times [spins]$$

génère la configuration finale :

$$(\cdots (\mathfrak{L}'_{\rho'-1}, l_{\rho'}^{w_{\rho'}} \alpha_{\rho'} L_{\rho'}) \mathfrak{L}, l_{\rho'}) \mathfrak{L}'_{\rho'}, \cdots L_{\sigma'-1}) \mathfrak{L}'_{\sigma'-1}, l_{\sigma'}) \mathfrak{L}' (l_{\sigma'}^{w_{\sigma'}} \alpha_{\sigma'} L_{\sigma'}) \mathfrak{L}'_{\sigma'}.$$

Mais ces recouplages doivent être menés pour tous les moments résultants de $\mathfrak{L}'_{\rho'-1}$ et $L_{\rho'}$ et aussi pour tous ceux de $\mathfrak{L}'_{\sigma'-1}$ et $l_{\sigma'}$ ou $\mathfrak{L}'_{\sigma'-1}$ et $l_{\sigma'}$ (et spins).

Il ne reste plus, dès lors, qu'à calculer :

$$r_i^k = \langle [(\mathfrak{L}, l_{\rho}) \mathfrak{L}_{\rho'}, \cdots \mathfrak{L}_{\sigma'-1}, l_{\sigma}) \mathfrak{L}' \| g^{(k)} \| [(\mathfrak{L}, l_{\rho'}) \mathfrak{L}'_{\rho'}, \cdots \mathfrak{L}'_{\sigma'-1}, l_{\sigma'}] \mathfrak{L}' \rangle$$

où $g^{(k)}$ est l'opérateur angulaire dilélectronique : $g^{(k)} = C_{(i)}^{(k)} \cdot C_{(j)}^{(k)}$.

Il est courant d'employer les opérateurs unitaires $u^{(k)}$ et $v^{(k1)}$ ainsi que leurs généralisations $U^{(k)}$ et $V^{(k1)}$ pour mettre en forme les coefficients directs et indirects :

$$r_{id}^k = \langle l_{\rho} \| C^{(k)} \| l_{\rho'} \rangle \langle l_{\sigma} \| C^{(k)} \| l_{\sigma'} \rangle I_{\rho\sigma}^{(k)}$$

$$r_{ie}^k = -\frac{1}{2} \langle l_{\rho} \| C^{(k)} \| l_{\sigma'} \rangle \langle l_{\rho'} \| C^{(k)} \| l_{\sigma} \rangle \times \sum_r (-1)^r [r] \left\{ \begin{matrix} l_{\rho} & l_{\rho'} & r \\ l_{\sigma} & l_{\sigma'} & k \end{matrix} \right\} [I_{\rho\sigma}^{(r)} + 4I_{\rho\sigma}^{(r1)}].$$

$$\begin{aligned} I_{\rho\sigma}^{(k)} = & (-1)^{\mathfrak{L}'_{\sigma'-1} + l_{\sigma} + \mathfrak{L}'} \left\{ \begin{matrix} \mathfrak{L}_{\sigma'-1} & l_{\sigma} & \mathfrak{L}' \\ l_{\sigma'} & \mathfrak{L}'_{\sigma'-1} & k \end{matrix} \right\} \\ & \times \left[\prod_{m=\rho'+1}^{\sigma'-1} U_a(\mathfrak{L}_{m-1} L_m \mathfrak{L}_m; k; \mathfrak{L}'_{m-1} \mathfrak{L}'_m) \right] \\ & \times \left[\delta_{\mathfrak{L},0} + (1 - \delta_{\mathfrak{L},0}) U_b(\mathfrak{L} l_{\rho} \mathfrak{L}_{\rho'}; k; l_{\rho'} \mathfrak{L}'_{\rho'}) \right] \\ & \times \langle l_{\sigma} \| u^{(k)} \| l_{\sigma'} \rangle \langle l_{\rho} \| u^{(k)} \| l_{\rho'} \rangle \end{aligned}$$

(ces deux derniers éléments valent $\delta_{l_\sigma k l_{\sigma'}}$ et $\delta_{l_\rho k l_{\rho'}}$ car $u^{(k)}$ est unitaire) : le premier terme découple les électrons l_σ et $l_{\sigma'}$ de l'ensemble, le second fait "disparaître" les électrons intermédiaires et l'avant dernier isole les électrons l_ρ et $l_{\rho'}$ de \mathfrak{L} .

Le calcul du coefficient angulaire de l'élément de matrice d'échange doit prendre en compte la présence des spins et génère l'apparition d'un facteur dont les différents termes ont la même signification que ceux du coefficient direct :

$$\begin{aligned}
I_{\rho\sigma}^{(r1)} &= (-1)^{\mathfrak{L}'_{\sigma'-1} + l_\sigma + \mathfrak{L}' + \mathfrak{S}'_{\sigma'-1} + s_\sigma + \mathfrak{S}'} \\
&\times \left\{ \begin{array}{ccc} \mathfrak{L}_{\sigma'-1} & l_\sigma & \mathfrak{L}' \\ l_{\sigma'} & \mathfrak{L}'_{\sigma'-1} & r \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} \mathfrak{S}_{\sigma'-1} & s_\sigma & \mathfrak{S}' \\ s_{\sigma'} & \mathfrak{S}'_{\sigma'-1} & 1 \end{array} \right\} \\
&\times \left[\prod_{m=\rho'+1}^{\sigma'-1} U_a(\mathfrak{L}_{m-1} L_m \mathfrak{L}_m; r; \mathfrak{L}'_{m-1} \mathfrak{L}'_m) U_a(\mathfrak{S}_{m-1} S_m \mathfrak{S}_m; 1; \mathfrak{S}'_{m-1} \mathfrak{S}'_m) \right] \\
&\times \left[\delta_{\mathfrak{L}\mathfrak{S},0} + (1 - \delta_{\mathfrak{L}\mathfrak{S},0}) U_b(\mathfrak{L} l_\rho \mathfrak{L}_{\rho'}; r; l_{\rho'} \mathfrak{L}'_{\rho'}) U_b(\mathfrak{S} s_\rho \mathfrak{S}_{\rho'}; 1; s_{\rho'} \mathfrak{S}'_{\rho'}) \right] \\
&\times \langle l_\rho s_\rho \| v^{(r1)} \| l_{\rho'} s_{\rho'} \rangle \langle l_\sigma s_\sigma \| v^{(r1)} \| l_{\sigma'} s_{\sigma'} \rangle
\end{aligned}$$

(ces deux derniers éléments valent $\sqrt{3/2} \delta_{l_\rho r l_{\rho'}}$ et $\sqrt{3/2} \delta_{l_{\sigma'} r l_\sigma}$).

Les termes angulaires complets $r^{(k)}$ s'écrivent alors :

$$\begin{aligned}
r^{(k)} &= B_1 B_2 B_{3\rho} B_{3\sigma} B_{4\rho'} B_{4\sigma'} B_5 B_6 \\
&\times \sum_{\mathfrak{L}\mathfrak{S}} R_x(\mathfrak{L}'_{\rho'-1} l_\rho \mathfrak{L}_{\rho'-1}, L_{\rho'} \mathfrak{L}_{\rho'}, \mathfrak{L}) R_s(\mathfrak{L}'_{\rho'-1} L_{\rho'} \mathfrak{L}, l_{\rho'} \mathfrak{L}'_{\rho'}, L'_{\rho'}) \times [spins] \\
&\times \sum_{\mathfrak{L}'\mathfrak{S}'} R_j(\mathfrak{L}'_{\sigma'-1} l_{\sigma'} \mathfrak{L}', L_{\sigma'} \mathfrak{L}'_{\sigma'}, L'_{\sigma'}) R_x(\mathfrak{L}_{\sigma'-1} L_{\sigma'} \mathfrak{L}_{\sigma'}, l_\sigma \mathfrak{L}'_{\sigma'}, \mathfrak{L}') \times [spins] \\
&\times r_i^{(k)}.
\end{aligned}$$

En fait, pour une excitation collisionnelle, tout ceci peut être légèrement simplifié en notant que $\mathfrak{L}' = \mathfrak{L}_\sigma = \mathfrak{L}'_{\sigma'}$, $\mathfrak{S}' = \mathfrak{S}_\sigma = \mathfrak{S}'_{\sigma'}$, $w_\sigma = w'_{\sigma'} = 1$ et $w'_\sigma = w_{\sigma'} = 0$.

Les coefficients modifiés sont :

$$B_2 = (-1)^{\Delta p} (w_\rho w_{\rho'})^{1/2} \text{ avec } \Delta p = \sum_{j=\rho+1}^{\rho'} w_j,$$

$$B_{3\sigma} = B_{4\sigma'} = 1,$$

$$B_6 = 1 \text{ et } i = \rho' \text{ dans } B_5 \text{ et}$$

$$r^{(k)} = B_1 B_2 B_{3\rho} B_{4\rho'} B_5$$

$$\times \sum_{\mathfrak{L}\mathfrak{S}} R_x(\mathfrak{L}'_{\rho'-1} l_\rho \mathfrak{L}_{\rho'-1}, L_{\rho'} \mathfrak{L}_{\rho'}, \mathfrak{L}) R_s(\mathfrak{L}'_{\rho'-1} L_{\rho'} \mathfrak{L}, l_{\rho'} \mathfrak{L}'_{\rho'}, L'_{\rho'}) \times [spins] \times r_i^{(k)}.$$

Annexe E

Forces d'oscillateur d'ions complexes

De même que pour l'annexe précédente concernant les éléments de matrice coulombiens d'ions complexes, cette annexe est largement inspirée de Cowan[19] (chapitre 14).

La transition la plus générale est du type : $l_1^{w_1} \dots l_i^n \dots l_j^{k-1} \dots l_q^{w_q} \leftrightarrow l_1^{w_1} \dots l_i^{n-1} \dots l_j^k \dots l_q^{w_q}$ où w, k et n représentent le nombre d'électrons des sous couches de moment angulaire l_i . La force d'oscillateur se présente aussi sous la forme d'un produit de facteurs :

$$\langle \Psi_b || \sum_m r_m^t C_m^{(t)} || \Psi_{b'} \rangle = D_1 D_2 \dots D_7 \langle l_i || r^t C^{(t)} || l_j \rangle$$

où l'élément de matrice réduit final vaut :

$$\langle l_i || r^t C^{(t)} || l_j \rangle = P_{l_i l_j}^{(t)} = (-1)^{l_i} [l_i, l_j]^{1/2} \begin{pmatrix} l_i & t & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \int_0^\infty P_{n_i l_i}(r) P_{n_j l_j}(r) dr.$$

Notons que nous avons conservé la forme la plus générale où t est un entier. Le reste de cet ouvrage ne fait mention que de transitions dipolaires électriques ou d'effet Stark pour lesquels $t = 1$. Une programmation plus ouverte a été effectuée pour accéder ultérieurement aux transitions multipolaires.

D_1 rend compte des différentes permutations pour l'antisymétrisation :

$$D_1 = (-1)^{\Delta p} (n.k)^{1/2}$$

où $\Delta p = k - 1 + \sum_{m=i+1}^{j-1} w_m$.

D_2 correspond aux coefficients de parentage fractionnel des sous-couches participant à la transition :

$$D_2 = (l_i^n \alpha_i L_i S_i \{ | l_i^{n-1} \alpha'_i L'_i S'_i \} (l_j^{k-1} \alpha_j L_j S_j \{ | l_j^k \alpha'_j L'_j S'_j \}.$$

D_3 est le découplage de \mathfrak{S}_q avec \mathfrak{L}_q et \mathfrak{L}'_q :

$$D_3 = \delta_{\mathfrak{S}_q \mathfrak{S}'_q} (-1)^{\mathfrak{L}_q + \mathfrak{S}_q + \mathfrak{J}'_q + t} [\mathfrak{J}_q, \mathfrak{J}'_q]^{1/2} \begin{Bmatrix} \mathfrak{L}_q & \mathfrak{S}_q & \mathfrak{J}_q \\ \mathfrak{J}'_q & t & \mathfrak{L}'_q \end{Bmatrix}.$$

D_4 est le découplage successif de $L_q, L_{q-1}, \dots, L_{j+1}$ si $q > j$:

$$D_4 = \prod_{m=j+1}^q \delta_{\alpha_m L_m S_m, \alpha'_m L'_m S'_m} \delta_{\mathfrak{S}_m \mathfrak{S}'_m} (-1)^{\mathfrak{L}_{m-1} + L_m + \mathfrak{L}'_m + t} \\ \times [\mathfrak{L}_m, \mathfrak{L}'_m]^{1/2} \begin{Bmatrix} \mathfrak{L}_{m-1} & L_m & \mathfrak{L}_m \\ \mathfrak{L}'_m & t & \mathfrak{L}'_{m-1} \end{Bmatrix}.$$

D_5 est le recouplage de $l_{i-1}^{w_{i-1}} (l_i^{n-1} l_i)$ vers $(l_{i-1}^{w_{i-1}} l_i^{n-1}) l_i$ si $i > 1$:

$$D_5 = \left(\prod_{m=1}^{i-1} \delta_{\alpha_m L_m S_m, \alpha'_m L'_m S'_m} \delta_{\mathfrak{L}_m \mathfrak{S}_m, \mathfrak{L}'_m \mathfrak{S}'_m} \right) R_s(\mathfrak{L}_{i-1} L'_i \mathfrak{L}'_i, l_i \mathfrak{L}_i, L_i) \\ \times R_s(\mathfrak{S}_{i-1} S'_i \mathfrak{S}'_i, s_i \mathfrak{S}_i, S_i)$$

les coefficients de déplacement R_s étant détaillés dans l'annexe précédente.

D_6 correspond au déplacement successif de l'électron l_i entre les couches i et m non-comprises (si $i < j - 1$) :

$$D_6 = \prod_{m=i+1}^{j-1} \delta_{\alpha_m L_m S_m, \alpha'_m L'_m S'_m} R_x(\mathfrak{L}'_{m-1} l_i \mathfrak{L}_{m-1}, L_m \mathfrak{L}_m, \mathfrak{L}'_m) \\ \times R_x(\mathfrak{S}'_{m-1} s_i \mathfrak{S}_{m-1}, S_m \mathfrak{S}_m, \mathfrak{S}'_m).$$

Enfin, D_7 simplifie l'élément de matrice rémanent, transformant :

$$< [(\mathfrak{L}'_{j-1} \mathfrak{S}'_{j-1}, l_i) \mathfrak{L}_{j-1} \mathfrak{S}_{j-1}, L_j S_j] \mathfrak{L}_j \mathfrak{S}_j \| r_N^t C_N^{(t)} \| [\mathfrak{L}'_{j-1} \mathfrak{S}'_{j-1}, (l_j^{k-1} L_j S_j, l_j) L'_j S'_j] \mathfrak{L}'_j \mathfrak{S}'_j >$$

en $< [\mathfrak{L}'_{j-1}, (L_j l_i) L] \mathfrak{L}_j \| r_N^t C_N^{(t)} \| [\mathfrak{L}'_{j-1}, (L_j l_j) L'_j] \mathfrak{L}'_j >$ où L est un moment orbital intermédiaire, puis $< l_i \| r^t C^{(t)} \| l_j >$:

$$D_7 = \delta_{\mathfrak{S}_j \mathfrak{S}'_j} R_j(\mathfrak{S}'_{j-1} s \mathfrak{S}_{j-1}, S_j \mathfrak{S}_j, S'_j) \\ \times (-1)^{L_j + l_j + L'_j} [\mathfrak{L}_{j-1}, L'_j, \mathfrak{L}_j, \mathfrak{L}'_j]^{1/2} \begin{Bmatrix} \mathfrak{L}_{j-1} & \mathfrak{L}'_{j-1} & l_i \\ L_j & L'_j & l_j \\ \mathfrak{L}_j & \mathfrak{L}'_j & t \end{Bmatrix}.$$

Bibliographie

- [1] M. ABRAMOWITZ ET I. A. STEGUN. *Handbook of mathematical functions*. Dover, New-York, 1964.
- [2] C. N. AFONSO, J. SOLIS, F. CATALINA, ET C. KALPOUZOS. *Appl. Phys. Lett.* **76** (1996), 2519.
- [3] K. M. AGGARWAL, F. P. KEENAN, ET S. J. ROSE. Electron impact excitation of al xiii : Collision strengths and rate coefficients. *Physica Scripta* **63** (2001), 95–103.
- [4] P. ALATERRE. *Spectroscopie X des plasmas créés par Laser; application à la détermination des gradients de densité et de température*. Thèse de doctorat, Université Paris VI, 1984.
- [5] N. R. BADNELL, W. J. DICKSON, D. C. GRIFFIN, M. S. PINDZOLA, ET H. P. SUMMERS. Density and field effects on dielectronic recombination in a generalised collisional-radiative model. 1–9.
- [6] A. BAR-SHALOM, M. KLAPISCH, ET J. OREG. Phase-amplitude algorithms for atomic continuum orbitals and radial integrals. *Comput. Phys. Comm.* **93** (1996), 21–32.
- [7] T. BARTSCH, A. MULLER, W. SPIES, J. LINKEMANN, S. SCHIPPERS, C. BRANDEAU, H. DANARED, D. R. DEWITT, H. GAO, W. ZONG, R. SCHUCH, A. WOLF, G. GWINNER, A. A. SAGHIRI, M. SCHMITT, M. BEUTELSPACHER, M. GRIESER, ET G. H. DUNN. Field enhanced dielectronic recombination of si 11+ and cl 14+ ions. *Physica Scripta* **T80** (1999), 305–306.
- [8] J. L. BASDEVANT. *Mécanique quantique*. éditions de l'Ecole Polytechnique, Palaiseau, 1993.
- [9] D. S. BELIĆ, G. H. DUNN, T. J. MORGAN, D. W. MUELLER, ET C. TIMMER. *Phys. Rev. Lett.* **50** (1983), 339.
- [10] H. A. BETHE ET E. E. SALPETER. *Quantum Mechanics of One or Two Electrons Atoms*. Springer, Berlin, 1957.
- [11] C. BLANCARD. *Communication privée* (1992).

- [12] C. BLANCARD ET J. DUBAU. Inelastic electron-ion scattering in hot and dense plasmas. *Laser and particle beams* **12**, n° 3 (1994), 401–406.
- [13] L. BONNET, S. JACQUEMOT, D. DESENNE, ET J. L. MIQUEL. Lasers à rayons x. *Chocs, revue scientifique et technique de la DAM / CEA*, n° 22 (1999), 163–73.
- [14] C. BRACHER, W. BECKER, S. A. GURWITZ, M. KLEBER, ET M. S. MARINOV. Three-dimensional tunneling in quantum ballistic motion. *American Journal of Physics* **66** (1998), 38.
- [15] CARTHY ET WEIGOLD. *Electron Ion Collisions*. 1993.
- [16] G. CHABRIER. *cours de l'ENS Lyon : L'équation d'état en astrophysique*.
- [17] A. Y. CHIRKOV ET V. I. KHVESYUK. Comparison of tandem mirror reactors using $d-t$, alternative $d-^3\text{he}$ and catalysed $d-d$ fuel cycles. *Transactions of fusion technology* **39** (2001), 402–405.
- [18] C. COHEN-TANNOUDJI, B. DIU, ET F. LALOE. *Mécanique quantique*. Hermann, Paris, 1973.
- [19] R. D. COWAN. *The theory of atomic structure and spectra*. University of California Press, Berkeley, 1981.
- [20] R. DAUTRAY ET J. P. WATTEAU. *La Fusion Thermonucléaire Inertielle par Laser, série Synthèses du CEA*. Eyrolles, Paris, 1993.
- [21] J. DAVIS ET M. BLAHA. Level shift and inelastic electron scattering in dense plasma. *J. Quant. Spectr. Rad. Transfer* **27**, n° 3 (1982), 307–313.
- [22] A. V. DEMURA, D. GILLES, ET C. STEHLÉ. *J. Quant. Spectr. Rad. Transfer* **54** (1995), 123.
- [23] B. D'ÉTAT. *Thèse d'état*. Thèse de doctorat, Université Paris XI, 1987.
- [24] N. W. C. DHARMA-WARDANA ET TAYLOR. Exchange and correlation potentials for finite temperature quantum calculations at intermediate degeneracies. *J. Phys. C* **14** (1981), 629–646.
- [25] J. DIAS-VALDÉS ET F. A. GUTIERREZ. Spherical versus non-spherical screening effects for electron impact excitation of hydrogenic ions. *Phys. Lett. A* **193** (1994), 154–158.
- [26] V. FABRETTI. *Modélisation de l'émission X des raies K_α dans les plasmas créés par impulsion laser ultracourte (sib-picoseconde) et ultra-intense (10^{18}W cm^{-2})*. Thèse de doctorat, Université de Provence, 1997.
- [27] U. FANO ET A. R. P. RAU. *Atomic collisions and spectra*. Academic Press, London, 1986.

- [28] H. FRIEDRICH. *Theoretical Atomic Physics*. Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- [29] C. FROESE-FISCHER. *The Hartree-Fock Method for Atoms, a numerical approach*. John Wiley, New York, 1977.
- [30] D. GILLES. Calcul de la répartition statistique du microchamp électrique dans les plasmas. étude comparée des différentes méthodes existantes, analytiques et numériques, et établissement d'un lissage analytique. Note technique ref. CEA-E.P. 2353-02, CEA, 1997.
- [31] D. GILLES ET O. PEYRUSSE. Fast and accurate line shape modeling of the h- and he-like lyman series for radiative transfer calculations in plasmas. *J. Quant. Spectr. Rad. Transfer* **53**, n° 6 (1995), 647–661.
- [32] S. J. GOETT, R. E. H. CLARCK, ET D. H. SAMPSON. *At. Data Nucl. Data Tables* **25** (1980), 186.
- [33] H. R. GRIEM. *Principles of plasma spectroscopy*. Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
- [34] D. C. GRIFFIN, M. S. PINDZOLA, ET C. BOTTCHER. Distorted-wave calculations of dielectronic recombination as a function of electric field strength. *Phys. Rev. A* **33**, n° 5 (1986), 3124–3132.
- [35] F. A. GUTIERREZ ET J. DIAZ-VALDÉS. Effects of non-spherical screening for inelastic electron-ion scattering. *J. Phys. B* **27** (1994), 593–600.
- [36] P. L. HAGELSTEIN. Relativistic distorted-wave results for nickel-like gadolinium. *Phys. Rev. A* **34** (1986), 874–884.
- [37] Y. HAHN ET K. J. LAGATTUTA. Dielectronic recombination and related resonance processes. *Phys. Rep.* **166**, n° 4 (1988), 195–268.
- [38] G. H. HATTON, N. F. LANE, ET J. C. WEISHEIT. Inelastic electron-ion scattering in a dense plasma. *J. Phys. B* **14** (1981), 4879–4888.
- [39] R. J. W. HENRY. Excitation of atomic positive ions by electron impact. *Phys. Rep.* **68**, n° 1 (1981), 1–91.
- [40] R. J. W. HENRY. Applying large computers to problems in physics : electron collision cross sections in atomic physics. *Rep. Prog. Phys.* (1993), 327–362.
- [41] C. F. HOOPER, G. C. JUNKEL, M. A. GUNDERSON, ET D. A. H. JR. Plasma induced line shifts and line merging. *J. Phys. IV France* **10** (2000), 485–488.
- [42] D. R. INGLIS ET E. TELLER. Ionic depression of series limits in one-electron spectra. *Astro. J.* **90** (1939), 439–448.
- [43] V. L. JACOBS, J. DAVIS, ET P. C. KEPPLER. *Phys. Rev. Lett.* **37** (1976), 1390.

- [44] T. KATO ET S. NAKAZAKI. Recommended data for excitation rate coefficients of helium atoms and helium-like ions by electron impact. *At. Data Nucl. Data Tables* **42** (1989), 313–338.
- [45] G. G. KOCHENDOERFER ET R. A. MATHIES. *Isr. J. Chem.* **35** (1995), 211.
- [46] A. KROL, A. IKHELF, J. C. KIEFFER, D. A. BASSANO, C. C. CHAMBERLAIN, Z. JIANG, H. PEPIN, ET S. C. PRASAD. Laser-based microfocused x-ray source for mammography : Feasibility study. *Med. Phys.* **24**, n° 5 (1997), 725–732.
- [47] P. KRSTIĆ ET Y. HAHN. Modified atomic transition rates by plasma ion fields. *J. Quant. Spectr. Radiat. Transfer* **55**, n° 4 (1996), 499–517.
- [48] L. LANDAU ET E. LIFCHITZ. *Physique Théorique : Mécanique quantique*. Mir, Moscou, 1975.
- [49] J. K. LANYI. *J. Biol. Chem.* **272** (1997), 31209.
- [50] E. LEBOUCHER-DALIMIER, P. SAUVAN, P. ANGELO, A. POQUÉRUSSE, R. SCHOTT, E. DUFOUR, E. MINGUEZ, ET A. CALISTI. Observation of ion-ion correlation effects on emissivity and opacity of hot ultra-dense low z plasmas. *J. Quant. Spectr. Radiat. Transfer* **71** (2001), 493–504.
- [51] J. B. MANN. Collision strengths for iron ions. *At. Data Nucl. Data Tables* **29** (1983), 407–432.
- [52] G. MASSACRIER. *Effets de densité et de température sur les ions des plasmas denses et chauds : structure atomique dans un modèle multiconfigurationnel ; équilibre statistique*. Thèse de doctorat, Université Paris VI, 1988.
- [53] R. W. P. MCWHIRTER. *Plasma Diagnostic Techniques*. Huddleston and Leonard, 1965.
- [54] N. F. MOTT ET H. F. W. MASSEY. *The Theory of Atomic Collisions*. Oxford University Press, Oxford, 1965.
- [55] M. S. MURILLO ET J. C. WEISHEIT. Dense plasmas, screened interactions, and atomic ionization. *Phys. Rep.* **302**, n° 1 (1998), 1–65.
- [56] C. PECKER-WIMEL. *Introduction à la spectroscopie des plasmas*. Dunod, Paris, 1969.
- [57] F. PERROT. Communication privée.
- [58] F. PERROT. Influence of stark effect on inelastic electron-impact cross-sections in a neon plasma. *Physica Scripta* **37** (1988), 351–353.
- [59] O. PEYRUSSE. A model for the simulation of nonequilibrium line transfer in laboratory plasmas. *Phys. Fluids B* **4**, n° 7 (1992), 2007–2017.

- [60] O. PEYRUSSE. X-ray spectroscopy studies using the transpec code. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **51**, n° 1 (1994), 281–289.
- [61] O. PEYRUSSE. Atomic configuration averages and non-local thermodynamical equilibrium plasma spectroscopy calculations. *J. Phys. B* **32** (1999), 683–700.
- [62] O. PEYRUSSE. Cinétique des plasmas laser à très haut flux. *Clefs CEA* **41** (1999), 33–36.
- [63] M. S. PINDZOLA, D. C. GRIFFIN, ET C. BOTTCHEER. *Atomic Processes in Electron-Ion and Ion-Ion Collisions (NATO ASI Series B vol. 145 p.75*. Plenum, New York, 1987.
- [64] A. K. PRADHAN. *Phys. Rev. A* **28** (1983), 2223.
- [65] A. K. PRADHAN. *Astrophys. J.* **59** (1985), 183.
- [66] D. B. REISENFELD. Dielectronic recombination as a function of electric field strength. *Astrophys. J.* **398** (1992), 386–393.
- [67] M. E. RILEY ET D. G. TRUHLAR. *J. Chem. Phys.* **63** (1975), 2182.
- [68] F. J. ROGERS, H. C. GRABOSQUE, ET D. J. HARWOOD. Bound eigenstates of the static screened coulomb potential. *Phys. Rev. A.* **1**, n° 6 (1970), 1577–1586.
- [69] A. ROUSSE, C. RISCHEL, ET J. C. GAUTHIER. Femtosecond x-ray crystallography. *Rev. Mod. Phys.* **73**, n° 1 (2001), 17–31.
- [70] H. RUDER, G. WUNNER, H. HEROLD, ET F. GEYER. *Atoms in strong magnetic fields*. Springer Verlag, Berlin, 1994.
- [71] J. SAPIRSTEIN ET W. R. JOHNSON. The use of basic splines in theoretical atomic physics. *J. Phys. B* **29** (1996), 5213.
- [72] P. SAUVAN, P. ANGELO, A. CALISTI, E. LEBOUCHER-DALIMIER, ET E. MINGUEZ. Improving the dicenter model for hot dense plasmas : molecular stark effect. *J. Quant. Spectr. Rad. Transfer* **71** (2001), 675–687.
- [73] M. J. SEATON. *Atomic and Molecular Processes / The theory of excitation and ionization by electron impact (p.374-420)*. D. R. Bates / Academic Press, New York, 1962.
- [74] M. J. SEATON. *Adv. Atom. Molec. Phys.* **11** (1975), 83.
- [75] M. J. SEATON. *Rep. Prog. Phys.* **46** (1983), 167.
- [76] I. I. SOBELMAN. *Atomic Spectra and Radiative Transitions*. Springer-Verlag, Berlin, 1979.
- [77] I. I. SOBELMAN, L. A. VAINSHTEIN, ET E. A. YUKOV. *Excitation of Atoms and Broadening of Spectral Lines*. Springer-Verlag, Berlin, 1981.

- [78] S. SVANBERG. New developments in laser medicine. *Physica Scripta* **72** (1997), 69–75.
- [79] C. VALLI. *Microscopie de photodétachement de O^- et F^- : mesure des affinités électroniques et des déphasages par imagerie de fonction d'onde*. Thèse de doctorat, Université Paris XI, 1999.
- [80] M. H. VOS ET J. L. MARTIN. *BBA-Bioenergetics* **1411** (1999), 1.
- [81] B. L. WHITTEN, N. F. LANE, ET J. C. WEISHEIT. Plasma-screening effects on electron-impact excitation of hydrogenic ions in dense plasmas. *Phys. Rev. A* **29**, n° 2 (1984), 945–952.
- [82] I. D. WILLIAMS. Electron-ion scattering. *Rep. Prog. Phys.* **62** (1999), 1431–1469.
- [83] A. P. YUTSIS, I. B. LEVINSON, ET V. V. VANAGAS. *Mathematical apparatus of the theory of angular momentum*. National Technical Information Service, Springfield, 1962.